

# JMS-T2000GCのFD法と熱分解-GC-MS法による スチレンブタジエンゴム(SBR)製品の多角的な分析

## 関連製品:質量分析計(MS)

#### はじめに

SBRはスチレンと1,3-ブタジエンとの共重合からなる合成ゴムである。加工性が良く、高品質のものを安価に供給できることから自動車用のタイヤな ど多くの製品に使用されている。製品として使用する際には物性の改善や加硫スピードの向上ための他のポリマーとブレンドしたり、添加剤を加えるこ とが一般的である。

本MSTipsではJMS-T2000GCのFD法と熱分解-GC-MS法によるSBRの分析例を紹介する。FD法ではサンプルをエミッターに塗布し、イオン源に直接導入してソフトイオン化により検出する。1分以下の測定で分子イオンを検出することが可能である。SBRのようなポリマーを測定した際は、複数のオリゴマー由来のピークを含んだ複雑なマススペクトルが得られる。この場合でもKMD解析を用いることで容易に定性情報を取得可能である。主成分であるスチレン-ブタジエンコポリマーに対しては末端基の違いや重合度などによる分子量分布を視覚的に評価することが可能であり、それ以外のイオンピークに対しては組成推定による定性解析が可能である。FD法のみでは構造式の決定までは困難であるが、熱分解-GC-MS法を併用することでこれらの情報を効率的に取得可能である。またこれら2つの手法は測定可能な質量(=沸点)範囲を補うことができ、多角的な分析が可能である。



Figure 1 Schematic diagram of FD and Pyrolysis-GC-MS method

## 実験

サンプルには市販されているSBR製品(ゴム板)を用いた。FD法では10mgをテトラヒドロキシフラン(THF)1mLに浸漬したものを1µL程度エミッターに塗布して 測定した。熱分解-GC-MS法では0.5mgを秤量し測定した。熱分解-GC-MS法のイオン化にはEI法とFI法(Field Ionization)を用いた。得られたデータは msRepeatFinderおよびmsFineAnalysis AIを用いて解析した。Table 1に測定条件の詳細を示す。

#### Table 1 Measurement conditions

Pyrolyzer : EGA/PY-3030D (Frontier Lab)							
Sample amount	0.5mg						
Furnace Temperature	600°C						
Gas Chromatograph : 8890A GC (Agilent Technologies)							
Column	ZB-5MSi (Phenomenex)						
	30m x 0.25mm, 0.25μm						
Oven Temperature	40°C(2min)-10°C/min -320°C(30min)						
Split ratio	100 : 1						
Carrier gas	He, 1mL/min						

Mass Spectrometer : JMS-T2000GC (JEOL)									
Ion Source	EI/FI combination ion source								
Ionization	EI : 70eV								
	FI : FI emitter, Flashing 12mA 30msec								
	FD: FD emitter, 0-50mA@51.2mA/min								
IS Temperature	EI : 250°C, FI and FD : No heating								
GC-ITF Temperature	EI and FI : 250°C, FD : No heating								
Mass Range	EI and FI : <i>m/z</i> 10-800, FD : <i>m/z</i> 35-1600								
Drift compensation	EI : <i>m</i> /z 281.05, column bleed at end time								
	FI : <i>m</i> /z 281.05, reservoir every 15min								
	FD : None								

## 測定結果①-FD法

Figure 2にTICクロマトグラムおよびマススペクトルを示す。MSイオン源に導入されたサンプルは20秒程度でイオン化され検出された。クロマトグラム分離 がなくソフトイオン化法であるため、一つのマススペクトル中に複数の分子イオンが検出された。FD法はイオン源内での揮発により低質量(低沸点)成分の 検出が困難であるが、熱分解-GC-MS法での検出が困難な高質量(=高沸点)成分の検出が可能である。





Figure 3に上記マススペクトルから作成したKMDプロットを示す。KMDプロットでは共通の繰り返し構造を持つ化合物由来のイオンピークが直線上に並ぶ。またSBRのような共重合ポリマーの場合は格子状となる。黄色と緑の破線で囲んだグループはいずれもSBRであるが、スチレンとブタジエンの重合傾向が異なる。このことは2種類の性質の異なるSBRがブレンドされていることを示唆している。また赤色のピークはターゲットリストを用いて抽出した可塑剤や酸化防止剤などの添加剤である。*m/z* 704.49のピークは酸化防止剤のTris(nonylphenyl) phosphiteの酸化物(+O)であるが、高沸点化合物でありFD法でのみ検出が可能であった。



#### 測定結果②-熱分解-GC-MS法

日本電子株式会社

Figure 4にmsFineAnalysis AIの結果画面を、Table 2にピークリストを示す。ID027の2,2,4-trimethyl-1H-quinolineは低沸点化合物であり熱分解-GC-MS法でのみ検出が可能であった。またNISTライブラリー未登録物質であるため構造式の決定にはAI構造解析が必要であった。



#### Figure 4 Result window of msFineAnalysis AI

#### Table 2 Peak list

D         Rym         Res. III         Rym         Company Mark         Solid         Res. Res. Res. Res. Res. Res. Res. Res.	General			ieneral						Tota	l Result						
001         1.30         522         33.2372/s lpytopen ullife         7785-664 (mainth)         580         14.6         24.6         0.0         none         33.8971         0.10         0.01         0.01           001         1.6         550         55.00573         3.54 (x)	ID		RT [min]	Meas. RI [iu]	IM m/z	Compound Name	CAS# / PubChem CID	Lib.	Match Factor / AI Score	∆RI [iu]	Formula	DBE	Adduct/Loss	Calculated m/z	Mass Error [mDa]	lsotope Matching	El Fragment Coverage
900         1.36         530         56.04676 (1.2)-Cydopentatione         105-99 (ma)th         830         830         840         850         830         860		001	1.30	522	33.98736	Hydrogen sulfide	7783-06-4	mainlib	580	183	H2 S	0.0	none	33.98717	0.19	0.91	50
903         1.6.         554         66.04670 (1, 2x) dopentation         524.22 maints         828         C 188         2.0         none         66.0460         0.30         0.83         100           905         2.23         653         75.04691 [benzene         77.432 [maints         907         1         618         4.0         none         78.0460         0.53         0.98         100           907         3.64         765         92.0522 (1, 2x) doheadere         92.552 (1, and 16, 10)         10         11         618         4.0         none         90.0555         0.03		002	1.36	530	54.04678	1,3-Butadiene	106-99-0	) mainlib	904	141	C4 H6	2.0	none	54.04640	0.38	0.97	100
99         1.07         5.95         2.0         none         80.0025         0.05         0.05           905         2.23         33         20.00408         encence         17.4.2         C3H		003	1.61	561	66.04670	1,3-Cyclopentadiene	542-92-7	mainlib	889	38	C5 H6	3.0	none	66.04640	0.30	0.83	100
905         2.3         63.0         70.4642         Renee         77.4-32         Renear         1         67.44         4.0         none         70.4440         0.01           906         2.40         663         80.00221, 3.524 (backastine         120.242         100.1         100.1         100.1         100.1         100.1         100.0		004	1.67	569	68.06255	Cyclopentene	142-29-0	) mainlib	825	17	C5 H8	2.0	none	68.06205	0.50	0.96	100
900         2.40         663         30.06221         3.2-Cyclexalene         992-574         mainle         907         1         C/H8         3.00         none         80.06235         0.27         0.73         100           000         3.86         787         112.12491         heptane, 3-methylene         1034-2         namih         840         8         CH16         1.0         none         122.4265         0.34         0.70         1.00           000         4.78         384         108.09237         Cyclexane, 4-ethenyl-         100-042         namih         890         5         CH10         0.0         none         105.0770         0.24         0.22         100           013         5.42         800         105.07736         CM40         none         106.0776         0.44         0.93         1.02           013         5.62         882         100.0935         CM10         5         CH10         5.0         CH10         5.0         none         118.0770         0.04         0.66         1.00           014         6.61         15.07778         CM401         10.06         10.0735         CM411         1.00         1.00         1.00         1.00         1.0		005	2.32	653	78.04691	Benzene	71-43-2	mainlib	907	1	C6 H6	4.0	none	78.04640	0.51	0.98	100
900         3.66         767         92.0623         70         10         718         4.0         none         92.06235         0.37         0.88         100           900         4.78         834         108.0937         (Yudohsene, 4-then)-         100-40         mainlib         930         5         C B112         3.0         none         108.0933         0.36         0.71         100-10           913         5.4         800         105.0734         (Yudohsene, 4-then)-         100-42-1         mainlib         930         5         C B112         3.0         none         108.0933         0.13         0.88         0.01         C B122         3.0         none         108.0933         0.13         0.88         0.01         C B122         0.0         C B123         0.0         D B183         0.0         D B133         0.0         D B13         D B13         D B13 <thd b13<="" th="">         D B13         D B1</thd>		006	2.40	663	80.06232	1,3-Cyclohexadiene	592-57-4	mainlib	894	8	C6 H8	3.0	none	80.06205	0.27	0.73	100
908         3.6         787         112.1249         Megana         Megana         Solar         Cyclosene, 4-thenyl-         100-43         mainlib         920         S         C8H16         1.0         none         102.0333         0.03         0.70         100           001         5.24         880         106.0373         Cyclosene, 4-thenyl-1         100-43-fmainlib         923         S         C8H10         4.0         none         106.0373         0.02         0.22         100           011         5.42         870         106.0323         Systeme         100-43-fmainlib         828         0         C8H10         4.0         none         100.0335         0.26         0.75         100           011         5.52         833         100.0235         Systeme, propyl-         99-47-fmainlib         991         5         C8H10         5.0         none         118.0770         0.42         0.32         0.31         0.82         100           011         5.61         953         120.0235         Systeme, propyl-         136-51         nainlib         927         5         C9H10         5.0         none         118.0770         0.22         0.32         100           012		007	3.64	765	92.06242	Toluene	108-88-3	mainlib	907	1	C7 H8	4.0	none	92.06205	0.37	0.68	100
900         4.78         884         100.003732         Cycloherene, 4-tenteryi-         100-4-3 maintib         933         5         C 8H12         3.0         none         100.003770         Cycloherene         100         100         100         4.00         none         100.00383         0.36         0.71         100           011         5.44         800         100.00383         1.50         014         3.0         006         4.00         0.00         10.00383         0.12         0.00		008	3.96	787	112.12499	Heptane, 3-methylene-	1632-16-2	mainlib	840	8	C8 H16	1.0	none	112.12465	0.34	0.70	100
001         5.24         860         106.0778         Lth Upter Part of the State of the		009	4.78	834	108.09371	Cyclohexene, 4-ethenyl-	100-40-3	mainlib	923	5	C8 H12	3.0	none	108.09335	0.36	0.71	100
101         5.42         870         108.0388         1.5 Dimethyl-1.4-yc)dhexadiene         4130-05_1 mainth         980         0         C8H12         3.0         none         108.933         0.13         0.78         100           011         5.82         883         106.00235         System         104-25 mainth         980         5         C8H10         4.0         none         104.0625         0.02         0.75         100           011         6.51         953         120.09357         Benzene, propyi-         103.651         mainth         932         0         C9H10         5.0         none         118.0770         0.23         0.30         100           011         7.65         955         118.0770         0.23         0.59         118.0770         0.21         0.35         100           013         118.0770         0.23         1.55         10.5221         1.79mg, 3.phenyi-         105471-1.7 mainth         923         0         C1H10         5.0         none         118.0770         0.21         0.37         103           013         113.0         114.0         10.0         C1H10         5.0         none         14.0         5.0         none         14.0        <		010	5.24	860	106.07794	Ethylbenzene	100-41-4	mainlib	939	5	C8 H10	4.0	none	106.07770	0.24	0.92	100
101         5.80         882         104.06231         Styre         100-425         maintb         980         1         CRHB         5.0         none         110.66235         0.26         0.75         100           011         5.82         833         105.07736         Veryap(0]         0.93         88           011         6.71         105.07736         Veryap(0]         0.04         0.66         100           011         6.74         981         118.07773         Certay(0]         0.02         0.06         110         0.02         0.01         0.04         0.66         100           011         7.41         981         118.07780         Addthysyme         9843         maintib         932         0         CHHD         5.0         none         118.07770         0.21         0.03         0.63         100           011         8.50         1055         113.07781         2.35 tertahydro         12860084         aninitb         932         0         CHHD         5.0         none         118.07770         0.21         0.33         100           013         8.50         1045         116.02271         1-070yre, 3-phenyl-         10047-12         maintib         <		011	5.42	870	108.09348	1,5-Dimethyl-1,4-cyclohexadiene	4190-06-1	mainlib	828	0	C8 H12	3.0	none	108.09335	0.13	0.78	100
013         5.82         833         106.07726         c-Nylene         994 - 6 maintb         894         5         C8 H10         4.0         none         106.07770         -0.34         0.93         888           015         6.91         953         120.09357         Benzene, propyl-         103-65:1         maintb         932         0         C9 H10         5.0         none         118.0770         0.23         0.90         100           016         7.41         981         118.0770         0.42         0.42         0.73         100           017         7.65         995         118.0770         0.23         0.04         0.63         100           018         8.20         1028         118.0770         0.23         0.02         0.93         88           0108         8.20         1028         115.07281         Propres, Sphenyl-         101471.22         maintb         672         0         C1H10         6.0         none         118.0777         0.21         0.83         100           010         10.2         1151         13.002770         0.31         0.35         100           021         10.41         1164         146.10945         Benzene, pr		012	5.80	892	104.06231	Styrene	100-42-5	mainlib	980	1	C8 H8	5.0	none	104.06205	0.26	0.75	100
016         6.78         946         118.07774         Tetrayciol 33.10(2.8), 0(4.6)):non-2-ene		013	5.82	893	106.07736	o-Xylene	95-47-6	mainlib	894	5	C8 H10	4.0	none	106.07770	-0.34	0.93	88
Oils         6.91         953         120.09337         Percence, propyl-         103.06.57         mainlib         932         0         C9112         4.0         none         118.0773         0.23         0.23         0.03           015         7.45         995         118.0770         Lis0.073         Lis0.073 <thlis0.073< th=""> <thlis0.073< th=""> <thlis0.0< td=""><td></td><td>014</td><td>6.78</td><td>946</td><td>118.07774</td><td>Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene</td><td>-</td><td>mainlib</td><td>872</td><td>0</td><td>C9 H10</td><td>5.0</td><td>none</td><td>118.07770</td><td>0.04</td><td>0.66</td><td>100</td></thlis0.0<></thlis0.073<></thlis0.073<>		014	6.78	946	118.07774	Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene	-	mainlib	872	0	C9 H10	5.0	none	118.07770	0.04	0.66	100
016       7.41       981       118.07793       cMethylstyrene       98-83.9 mainib       926       0       0410       5.0       none       118.07770       0.23       0.90       100         017       7.65       995       118.07701       13.4 Methanopentalene, 1,2,3,5+trerahydro       15337.80 9 mainib       926       0       C 9H10       5.0       none       118.0777       0.21       0.87       83         018       8.20       1045       116.06227       1.2+ropyne, 3-phenyl-       10147-112       Mainib       932       0       C 9H10       5.0       none       118.0777       0.21       0.87       83       100         021       1051       116.06227       12+ropyne, 3-phenen(1-ethyl-2-cyclopapen-1yl)-       100471-12       Mainib       932       0       C 11H14       5.0       none       146.1990       0.45       0.42       100         021       10.41       1164       146.19908       Benzene, 1-exploremen-1yl-       1075-74-7       mainib       821       0       C 11H14       5.0       none       146.19900       0.068       0.94       1100         023       10.70       1183       162.14030       Denzene1-1-syl-       825-54-7       mainib       821<		015	6.91	953	120.09357	Benzene, propyl-	103-65-1	mainlib	932	0	C9 H12	4.0	none	120.09335	0.22	0.73	100
007         7.65         995         118.07800         Bity of (4.2.0) oct1,3,5-treine,7-methyl-         55337.89-s jaminib         926         0         C9H10         5.0         none         118.0770         0.20         0.63         0.00           013         8.50         1043         116.0627         1.79 optre, 3-phenyi-         10147-112         mainib         932         0         C10H10         6.0         none         118.0770         0.21         0.85         100           013         8.50         1043         115         130.0778         Benzene, 3-phenyi-         10147-112         mainib         932         0         C10H10         6.0         none         146.1090         0.45         0.42           013         103         1151         130.07778         Option         745         0.50         1114         5.0         none         146.1090         0.08         0.94         1000           013         1140         146         146.10938         Benzene, 2-cyclopropyletten/yl-         mainib         821         0         C12H18         0         0         0         146.10930         0.02         0.03         1000           024         1133 <th1344< th="">         1440         1318.090</th1344<>		016	7.41	981	118.07793	α-Methylstyrene	98-83-9	mainlib	917	5	C9 H10	5.0	none	118.07770	0.23	0.90	100
018         8.20         1028         118.07731         1.3-Methanopentalene, 1,2,3,5-tertahydro-         1280711         978         989           019         8.50         1045         116.06221         1'Propyne, 3-phenyl-         10147-112         mainib         932         0         C1H8         6.0         none         118.0770         0.21         0.35         1000           010         1155         146.10945         Benzene, 2-pentenyl-         10347112         mainib         820         C         C1H14         5.0         none         146.10900         0.45         0.42         0.00           012         10.31         1156         146.10945         Benzene, 3-pentenyl-         1075747         mainib         221         0         C1H14         5.0         none         146.0700         0.08         0.94         1000           023         10.70         1183         162.14019         Cyclostene, 5-diethenyl, trans-         53264714         mainib         824         0         C1H12         6.0         none         144.09335         0.02         0.03         1.000           024         1433         1342         14434         1731193         2-24-timethyl-Hapioline         8254-71         mainib         83		017	7.65	995	118.07800	Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene, 7-methyl-	55337-80-9	mainlib	926	0	C9 H10	5.0	none	118.07770	0.30	0.63	100
000       10.06 0.000       116.06222       1.07 propring - 3-phenyh       10147-11-2 mainib       932       0.0       C DH 10       6.0       none       116.06225       0.22       0.33       1000         000       10.28       1156       146.0093       Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-       650518.44 mainib       803       00       C10110       6.0       none       146.1090       0.45       0.42       1000         002       10.14       1164       146.10903       Benzene, 4-pentenyl-       1075747       mainib       822       0.0       C11114       5.0       none       146.10900       0.068       0.942       1001         002       10.13       162.1003       Cyclopropylethenyl-1		018	8.20	1028	118.07791	1,3-Methanopentalene, 1,2,3,5-tetrahydro-	128600-88-4	mainlib	672	0	C9 H10	5.0	none	118.07770	0.21	0.87	89
020         1151         130.0778         Benzene, Jentemyl 2-cyclopropen-1-yl)-         6505:83-4 mainlb         803         0         C10110         6.0         none         146.1090         0.45         0.42         100           021         10.28         1156         146.1090         Benzene, 3-pentemyl-         1745-16-0 mainlb         829         0         C11H14         5.0         none         146.1090         0.045         0.42         100           022         10.70         1183         162.14039         Cyclocetne, 5,6-diethenyl-, trans-         53264-71-4 mainlib         821         0         C12 H18         4.0         none         144.0935         0.0.2         0.71         1000           045         12.43         1300         144.09348         Benzene, 4-cyclopenten-1-yl-         8254-77         mainlib         890         0         C11H12         6.0         none         144.0935         0.0.2         0.83         100           025         12.92         1337         158.10902         Benzene, 3-cyclohexen-1-yl-         8254-77         mainlib         890         0         C11H12         6.0         none         173.1098         0.020         0.81         100           028         14.34         1444<		019	8.50	1045	116.06227	1-Propyne, 3-phenyl-	10147-11-2	mainlib	932	0	C9 H8	6.0	none	116.06205	0.22	0.93	100
021         1028         1156         146.10945         Benzneng, 3-pentenyl-         1745-16-0         mainlib         829         0         C11 H14         5.0         none         146.10900         0.48         0.42         100           023         10.41         1164         146.10900         Renzene, 3-pentenyl-, trans-         5326-77-4         mainlib         821         0         C11 H14         5.0         none         162.1000         0.08         0.94         100           023         10.07         1138         162.14019         Cyclopropylethenyl-, trans-         5326-77-4         mainlib         821         0         C11 H12         6.0         none         144.09335         0.02         0.55         100           025         12.43         1300         144.09348         Benzene, 3-cyclohexen-1yl-         489-55-57         mainlib         822         8         C12 H14         6.0         none         173.1090         0.02         8.3         100           023         14.37         1444         173.1194         2,2+trimethyl-H-quinoline         893.7         8         C12 H15         6.0         none         173.11990         0.056         0.94         100           024         16.61		020	10.20	1151	<u>130.07789</u>	Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	65051-83-4	mainlib	803	0	C10 H10	6.0	none	130.07770	0.19	0.35	100
022         10.41         1164         146.1098         Benzene, 4-pentenyl-         1075-74-7         mainlib         727         24         C11 H14         5.0         none         146.1090         0.08         0.94         100           023         10.70         1183         1162.1403         Cyclocetne, 5,6-diethenyl, trans-         5324-714         mainlib         821         0         C11 H12         6.0         none         146.10930         -0.12         0.71         100           023         10.81         1190         144.09358         Benzene, 1-cycloperpten-nyl-         825-54-7         mainlib         824         0         C11 H12         6.0         none         144.09335         0.0.2         0.55         100           023         11.34         1444         173.1194         2,2+trimethyl-1H-quinoline         8994         0         C12 H15N         6.0         none         173.199         -0.56         0.44         100           023         14.3         1447         157.0880         Quinoline, 2,7-dimethyl-         93-37.8         mainlib         880         0         C1H111N         7.0         none         157.0880         0.02         0.74         100           023         16.1         <		021	10.28	1156	146.10945	Benzene, 3-pentenyl-	1745-16-0	) mainlib	829	0	C11 H14	5.0	none	146.10900	0.45	0.42	100
022         10.70         1133         162.14019 Cyclooctne, 5,6-diethenyl-, trans-         53264-71-4         mainlib         821         0         C12 H13         4.0         none         162.1403         -0.12         0.71         100           024         10.81         1190         144.09355         Benzene, (2-cyclopropylethenyl)-         -         mainlib         824         0         C11H12         6.0         none         144.09335         0.20         0.53         100           025         12.92         1337         158.10902         Benzene, 3-cyclohexen-1-yl-         8254-7         mainlib         892         8         C12H14         6.0         none         138.1090         0.02         0.83         100           028         14.32         1447         157.08800         Quol noine         157.0880         Quol noine         157.0880         Quol 0         0.02         0.83         100           029         16.61         1630         212.15574         (18, Raras, Atrans)         -         -         mainlib         874         1         C16H20         7.0         none         212.15595         -Q.22         0.81         100           030         21.31575         256.23981         n-Hexacacanoia acid		022	10.41	1164	146.10908	Benzene, 4-pentenyl-	1075-74-7	mainlib	727	24	C11 H14	5.0	none	146.10900	0.08	0.94	100
024         10.81         1190         144.09355         Benzene, (2-cyclopropylethenyl)-		023	10.70	1183	162.14019	Cyclooctene, 5,6-diethenyl-, trans-	53264-71-4	mainlib	821	0	C12 H18	4.0	none	162.14030	-0.12	0.71	100
025         12.43         1302         144.09348         Benzene, 1-cyclopenten-1-yl-         825-54-7         mainlib         869         0         C11 H12         6.0         none         144.09335         0.12         0.93         100           025         12.92         1337         158.1090         Benzene, 3-cyclohexen-1-yl-         4894.165         mainlib         892         8         C12 H14         6.0         none         158.1090         0.02         0.83         100           027         14.34         1444         173.1934         2,4-trimtehyl-1-Hounolne         8890         0         C1 H11N         7.0         none         157.0880         0.02         0.43         100           028         14.37         1447         157.0880         Quinoine, 2,7-dimethyl-3,4-divinyl-, Cyclohexae, 1-phenyl-3,4-divinyl-, Cyclohexae, 1-phenyl-3,4-divinyl-, Cyclohexae, 1-phenyl-3,4-divinyl-, Cyclohexae, 1-phenyl-3,4-divinyl-, Cyclohexae, 1-phenyl-3,4-divinyl-, Cyclohexae, 1-phenyl-3,4-divinyl-, Cyclohexae         -		024	10.81	1190	144.09355	Benzene, (2-cyclopropylethenyl)-	-	mainlib	824	0	C11 H12	6.0	none	144.09335	0.20	0.55	100
025         12.92         1337         158.10902         Bernere, 3-cyclohexen-1yl-         4994-16-5         mainlib         892         8         C12 H14         6.0         none         158.10900         0.02         0.83         100           007         14.34         1444         173.11934         2,2,4+trimethyl-1H-quinoline         8981,Al         890         0         C12 H15 N         6.0         none         173.11990         -0.56         0.94         100           028         14.37         1444         157.08800         Quoto p.7,2-dimethyl-1         93-37.8         mainlib         830         2.4         C11 H11 N         7.0         none         157.0880         0.20         0.74         100           029         16.61         1630         221.15574         (18,3trans,4trans)         -         -         mainlib         887         0         C16420         7.0         none         212.1559         -0.22         0.81         100           030         21.05         284.2704         Cddeacanoic acid         57-10-3         mainlib         854         11         C16H20         7.0         none         282.2553         0.69         0.77         100           031         21.49 <t< td=""><td></td><td>025</td><td>12.43</td><td>1302</td><td>144.09348</td><td>Benzene, 1-cyclopenten-1-yl-</td><td>825-54-7</td><td>mainlib</td><td>869</td><td>0</td><td>C11 H12</td><td>6.0</td><td>none</td><td>144.09335</td><td>0.12</td><td>0.93</td><td>100</td></t<>		025	12.43	1302	144.09348	Benzene, 1-cyclopenten-1-yl-	825-54-7	mainlib	869	0	C11 H12	6.0	none	144.09335	0.12	0.93	100
027         14.34         1444         173.11934         2,2,4 trimethyl-1H-quinoline         8981         A         890         0         C12 H15 N         6.0         none         173.11990         -0.56         0.94         100           028         14.37         1447         157.0880         Quinoline, 2,7-dimethyl-         93.37.8         mainlib         830         24         C11H1N         7.0         none         157.0880         0.20         0.74         100           029         16.61         1630         212.15574         (18,37an,4trans)		026	12.92	1337	158.10902	Benzene, 3-cyclohexen-1-yl-	4994-16-5	mainlib	892	8	C12 H14	6.0	none	158.10900	0.02	0.83	100
023         14.37         1447         157.08800         Quindine, 2,7-dimethyl-         93-37-8         mainlib         830         2.4         C11 H11 N         7.0         none         157.08800         0.00         0.74         100           029         16.61         1530         22.15575         C/c/clohexane, 1-phenyl-3,4-divinyl-, C/clohexane, 1-phenyl-3,2-divinyl-1,2- diazepentacyclo[11.7.0.3,11.04,9.015,20](cos)         830         54         C21 H20         12.0         none         330.2005         -0.02         0.10         0.02         0.47         100           033         25.17         25.30         300.2052         Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)-         2769-940         Painlib         839         54         C22 H22 O         12.0         none <td></td> <td>027</td> <td>14.34</td> <td>1444</td> <td>173.11934</td> <td>2,2,4-trimethyl-1H-quinoline</td> <td>8981</td> <td>AI</td> <td>890</td> <td>0</td> <td>C12 H15 N</td> <td>6.0</td> <td>none</td> <td>173.11990</td> <td>-0.56</td> <td>0.94</td> <td>100</td>		027	14.34	1444	173.11934	2,2,4-trimethyl-1H-quinoline	8981	AI	890	0	C12 H15 N	6.0	none	173.11990	-0.56	0.94	100
C29         Inc.         Cyclohexane, 1-phenyl-3,4-divinyl-, (12,15574)         Inc.         mainlib         887         O         C16H20         To         Inc.         Last State         Inc.         <		028	14.37	1447	157.08880	Quinoline, 2,7-dimethyl-	93-37-8	mainlib	830	24	C11 H11 N	7.0	none	157.08860	0.20	0.74	100
029         16.61         1530         212.15574 (18,3rans,4rans)-         - mainlib         887         0         C16 H20         7.0         none         212.15595         -0.22         0.81         100           030         20.13         1957         256.23981         n-Hexadecancicacid         57-10.3         mainlib         854         11         C16 H32O         1.0         none         226.23986         0.12         0.78         100           031         21.87         2140         282.25000 OleicAcid         112.80-1 mainlib         774         1         C18 H36 O2         1.0         none         282.2753         0.69         7.7         100           032         22.05         284.27042         Ocdadecanoic acid         57-11.4         mainlib         905         13         C18 H36 O2         1.0         none         282.2708         -0.57         0.77         100           033         24.49         2445         300.20820         Dehydroabletic acid         174-19         mainlib         954         C2 H22O         1.0         none         300.2083         -0.18         0.72         1.07         92           035         25.17         2530         302.2654         Bis2-ethylhexyl phthalate						Cyclohexane, 1-phenyl-3,4-divinyl-,											
030       20.13       1957       256.23981       n-Hexadecanoic acid       57-10-3       mainlib       854       11       C16 H32 O2       1.0       none       256.23968       0.12       0.78       100         031       21.87       2140       282.2560       Olei Acid       112-80-1       mainlib       774       1       C18 H34 O2       2.0       none       282.2553       0.69       0.77       100         032       22.05       2159       284.27042       Octadecanoic acid       57:14-4       mainlib       975       13       C18 H34 O2       1.0       none       282.2553       0.69       0.77       100         033       24.49       2445       300.20820       Dehydroabletic acid       1740-19-8       mainlib       843       12       C20 H28 O2       7.0       none       302.0838       -0.18       0.72       100         034       24.78       2480       302.16652       Phenol, 2.4-bis(1-phenylethyl)-       2769-94-0       mainlib       839       54       C2 H22 O       12.0       none       302.16652       -0.27       0.71       92         035       25.17       2530       390.2764       Bis(2-ethylhexyl) phthalate       117.81-7       mainlib </td <td></td> <td>029</td> <td>16.61</td> <td>1630</td> <td>212.15574</td> <td>(1R,3trans,4trans)-</td> <td>-</td> <td>mainlib</td> <td>887</td> <td>0</td> <td>C16 H20</td> <td>7.0</td> <td>none</td> <td>212.15595</td> <td>-0.22</td> <td>0.81</td> <td>100</td>		029	16.61	1630	212.15574	(1R,3trans,4trans)-	-	mainlib	887	0	C16 H20	7.0	none	212.15595	-0.22	0.81	100
031       21.47       2140       282.25602       0 clcAcid       112-80-1       mainlib       774       1       C18 H34 0.2       2.0       none       282.25533       0.69       0.77       100         032       22.05       2159       284.27042       Octadecanoic acid       57.11-4       mainlib       976       13       C18 H36 0.2       1.0       none       282.25533       0.69       0.77       100         033       22.45       2445       300.2020       Dehydroabietic acid       1740-198       mainlib       843       12       C20 H2020       7.0       none       300.21652       -0.57       0.77       100         034       24.45       2480       302.16625       Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)-       2769-94-0       mainlib       839       54       C22 H22 0       12.0       none       302.16652       -0.27       0.71       92         035       25.17       2530       302.7654       Bis(2-ethylhexyl) phthalate       117-81-7       mainlib       978       5       C24 H38 04       6.0       none       302.16652       -0.27       0.71       92         036       26.77       2742       330.2002 a-4,6,8,11,15,17,19-heptaene       33568       Al       <		030	20.13	1957	256.23981	n-Hexadecanoic acid	57-10-3	mainlib	854	11	C16 H32 O2	1.0	none	256.23968	0.12	0.78	100
022         22.05         2159         284.27042         Octadecanoic acid         57-11-4 mainlib         905         13         C18 H36 O2         1.0         none         284.2708         -0.57         0.77         100           033         24.49         2445         300.20820         Dehydroabletic acid         1740-19-8         mainlib         905         13         C18 H36 O2         7.0         none         300.20838         -0.57         0.77         100           034         24.478         2480         300.20820         Dehydroabletic acid         1740-19-8         mainlib         926         C2 DH28 O2         7.0         none         300.20838         -0.18         0.72         100           034         24.78         2480         300.26825         Phenol, 2,4-bis[1-phenylethyl)-         2769-94-0 mainlib         839         54         C2 H38 O4         6.0         none         300.20838         -0.08         0.84         100           035         25.17         2530         390.2764         Bis2(-ethylhexyl) phthalate         117-81-7         mainlib         978         5         C24 H38 O4         6.0         none         330.2095         0.08         0.84         100           036         2.67.7		031	21.87	2140	282.25602	Oleic Acid	112-80-1	mainlib	774	1	C18 H34 O2	2.0	none	282.25533	0.69	0.77	100
033       24.49       2445       300.20820       Dehydroabietic add       1740-19-8       mainlib       843       12       20 H28 02       7.0       none       300.20838       -0.18       0.72       100         034       24.78       2480       302.16625       Phenol, 2.4 bis(1-phenylethyl)-       2769-94-0       mainlib       839       54       C2 H22 O       12.0       none       302.16652       -0.27       0.71       92         035       25.17       2530       390.27654       Bis(2-ethylhexyl) phthalate       117.81-7       mainlib       978       5       C2 H38 04       6.0       none       390.27664       0.08       0.84       100         036       26.77       2742       330.20802       a-6,8,11,5,17,19-hptapene       343568       Al       899       0       C2 H26 N2       12.0       none       302.0902       -1.08       0.79       88         037       28.70       3017       406.22813       Phenol, 2.4,6-tris(1-phenylethyl)-       18254-13-2       mainlib       78       7       C30 H300       16.0       none       406.22912       -1.08       0.77       88         037       28.70       3035       406.2281       Phenol, 2.4,6-tris(1-phenylethyl)-		032	22.05	2159	284.27042	Octadecanoic acid	57-11-4	mainlib	905	13	C18 H36 O2	1.0	none	284.27098	-0.57	0.77	100
014         24.78         2480         302.16625         Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)-         2769-94-0         mainlib         839         54         C22 H22 O         12.0         none         302.16652         -0.27         0.71         92           015         25.17         2530         390.27654         Bis(2-ethylhexyl) phthalate         117-81-7         mainlib         978         5         C2 H38 O4         6.0         none         390.2766         0.08         0.84         100           015         25.17         2530         390.2764         Bis(2-ethylhexyl) phthalate         117-81-7         mainlib         978         5         C2 H38 O4         6.0         none         390.2764         0.08         0.84         100           016         277         2742         330.2002         a-6,8,8,11,5,17,19-heptaene         33568 Al         899         0         C 23 H26 N2         12.0         none         303.0005         -1.08         0.79         88           037         2870         303.02002         a-6,8,8,11,5,17,19-heptaene         33568 Al         899         0         C 23 H26 N2         12.0         none         303.02005         -1.08         0.79         88           037         2870         <		033	24.49	2445	300.20820	Dehydroabietic acid	1740-19-8	mainlib	843	12	C20 H28 O2	7.0	none	300.20838	-0.18	0.72	100
035         25.17         2530         390.27654         Bis/2-ethylhexyl phthalate         117-81-7         nainlib         978         5         C24 H38 04         6.0         none         390.27646         0.08         0.84         100           015         25.17         2530         390.27654         Bis/2-ethylhexyl phthalate         117-81-7         nainlib         978         5         C24 H38 04         6.0         none         390.27646         0.08         0.84         100           045         26.77         2742         330.2002/a -4.68,11,5,17,19-heptaene         34366 AI         899         0         C23 H26 N2         12.0         none         330.2005         -1.08         0.79         88           037         2742         330.2002/a -4.68,11,15,17,19-heptaene         34366 AI         899         0         C23 H26 N2         12.0         none         330.2005         -1.08         0.78         88           037         28.07         406.22831         Phenol, 2,4.6 tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2 mainlib         785         7         C30 H300         16.0         none         406.22912         -0.81         0.72         100           088         28.81         3035         406.22812         Phenol, 2,4.6 t		034	24.78	2480	302.16625	Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)-	2769-94-0	) mainlib	839	54	C22 H22 O	12.0	none	302.16652	-0.27	0.71	92
036         26.77         2742         330.20802         a-4,6,8,11,15,17,19-heptaene         343568         Al         899         0         C23 H26 N2         12.0         none         330.20905         -1.03         0.79         88           037         28.70         3017         406.22831         Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2         mainlib         782         11         C30 H30 O         16.0         none         406.22912         -1.28         0.67         100           038         28.81         3035         406.22813         Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2         mainlib         785         7         C30 H30 O         16.0         none         406.22912         -0.81         0.72         100		035	25.17	2530	390.27654	Bis(2-ethylhexyl) phthalate	117-81-7	mainlib	978	5	C24 H38 O4	6.0	none	390.27646	0.08	0.84	100
036         26.77         2742         330.20802         a-4,6,6,11,5,17,19-heptaene         34368         Al         899         0         C23H26N2         12.0         none         300.20802         -1.08         0.7         88           037         28.80         3035         406.22831         Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2         mainlib         785         7         C30H30.0         16.0         none         406.22912         -0.81         0.72         100						10, 10, 13, 14, 14-pentamethyl-1, 3-											
036         26.77         2742         330.20802         a-4,6,8,11,15,17,19-heptaene         343568         Al         899         0         C23 H26 N2         12.0         none         330.20905         -1.03         0.79         88           037         28.70         3017         406.22783         Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2         mainlib         782         11         C30 H30 O         16.0         none         406.22912         -1.28         0.67         100           038         28.81         3035         406.22831         Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2         mainlib         785         7         C30 H30 O         16.0         none         406.22912         -0.81         0.72         100						diazapentacyclo[11.7.0.03,11.04,9.015,20]icos											
037         28.70         3017         406.22783         Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2         mainlib         782         11         C30 H30 O         16.0         none         406.22912         -1.28         0.67         100           038         28.81         3035         406.22831         Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2         mainlib         785         7         C30 H30 O         16.0         none         406.22912         -0.81         0.72         100		036	26.77	2742	330.20802	a-4,6,8,11,15,17,19-heptaene	343568	AI	899	0	C23 H26 N2	12.0	none	330.20905	-1.03	0.79	88
038         28.81         3035         406.22831         Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-         18254-13-2         majalib         785         7         C30 H30 O         16.0         none         406.22912         -0.81         0.72         100		037	28.70	3017	406.22783	Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-	18254-13-2	mainlib	782	11	C30 H30 O	16.0	none	406.22912	-1.28	0.67	100
		038	28.81	3035	406.22831	Phenol, 2,4,6-tris(1-phenylethyl)-	18254-13-2	mainlib	785	7	C30 H30 O	16.0	none	406.22912	-0.81	0.72	100

mainlib = The compound name and structural formula obtained by NIST library, AI = AI predicted library

### まとめ

JMS-T2000GCのFD法と熱分解-GC-MS法を用いSBR製品の分析を行った。FD法では短時間の測定でブレンドされたポリマーや添加剤に関する大まかな定性情報を取得することが出来た。熱分解-GC-MS法では構造式など詳細な定性情報を取得することが出来た。これら2つの手法を併用することで効率的な 定性情報の取得が可能であった。

この資料に掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせください。

