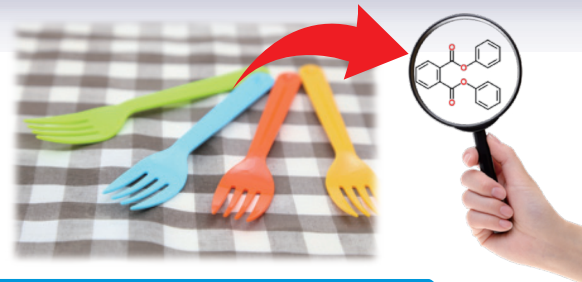


材料の添加剤分析を
されている方に朗報!!

Compound Search Ver.1.1

化学工業用データベース 第1版

ionRocket-DART-MS などのアンビエントイオン化による材料分析では、前処理不要で迅速に材料分析(添加剤や基材などの分析)が可能です。しかしながら得られたマススペクトルの解析が容易ではないという課題がありました。



本データベースがその課題を解決します!

特長

- ・本データベースは一般的なネット上の化合物検索と異なり、化学工業分野に特化した成分のみを収載しておりますので、材料分野に用いられる成分のみを検索できます。
- ・ユーザーデータを登録することもできるため、オリジナルデータベースの作成も可能です。

[Contents]

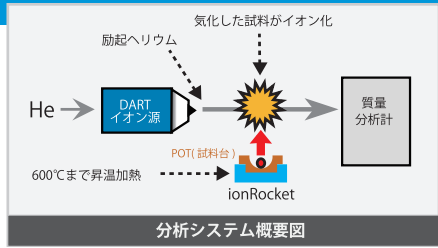
収載数 : 約 1300 成分

収載成分例 : 可塑剤、酸化防止剤、紫外線吸収剤、難燃剤、硬化剤、架橋剤、色材、滑剤、モノマー類

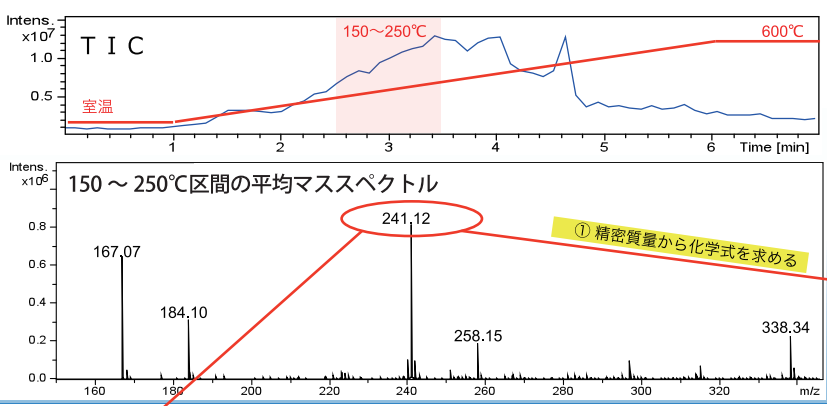
収載項目 : 成分名、化学式、質量情報、CAS No.、ChemSpider ID、融点、沸点、用途、製品名
(成分によっては記載のない項目もあります) * Microsoft Windows10 にて動作確認済み

■本データベースの使用例

- ・試料 : 架橋ポリ乳酸 (PLA)
- ・方法 : Figure 1 の分析システムにて、0.5mm 角程度の試料を室温から 600℃まで 100℃/min で昇温を実施



- ① 測定により得られたマススペクトルから質量分析計の解析ソフトにて化学式を求める。
- ② 『Compound Search』に目的ピークの m/z 値を入力する。
- ③ 「検索ボタン」を押すと、該当成分が表示される。
- ④ 得られた結果から、①で求めた化学式と一致するものが該当する成分であると判断する。
- ⑤ 本データベースから直接 ChemSpider にアクセスすることができるため、構造式を確認することも可能である。



SmartFormula Manually

Lower formula: Upper formula:

Measured m/z: 241.1238 Tolerance: 10 ppm Charge: 1

Meas. m/z	#	Ion Formula	Score	m/z	err [mDa]	err [ppm]	mSigma	rdb	e ⁻
241.1238	1	C ₁₆ H ₁₇ O ₂	n.a.	241.1223	-1.5	-6.2	n.a.	8.5	ev

② 検出されたピークの m/z 値を入力

③ 検索を実行すると該当成分が出力される

④ 精密質量から求められた化学式と一致していれば定性完了

Compound Name(JP)	Compound Name(EN)	Chemical Formula	Base Peak	Molecular Weight	Adduct	m/z of Observed peak	CAS No.	ChemSpider ID	Melting Point	Boiling Point	Application
ベンゾインエチルエーテル	Benzoïn Ethyl Ether	C ₁₆ H ₁₆ O ₂	240.11	240.30	H+	241.1178	574-09-8	81960	64°C	96°C	重合開始剤
テトラメチルチウラムジスルフィド	Tetramethylthiuram Disulfide	C ₈ H ₁₂ N ₂ S ₄	239.99	240.43	H+	240.9978	197-26-8	92484	152°C	268°C	加硫剤・架橋剤
ドデシルアクリレート	Dodecyl Acrylate	C ₁₅ H ₂₈ O ₂	240.21	240.38	H+	241.2178	2158-92-0	91960			重合開始剤
ネオペンチルグリコールジメタクリレート	Neopentyl Glycol Dimethacrylate	C ₁₉ H ₂₈ O ₄	240.14	240.30	H+	241.1478	1985-51-9	15119		302°C	モノマー類
2,2-ビス(4-ヒドロキシシクロヘキシル)プロパン	2,2-Bis(4-hydroxycyclohexyl)propane	C ₁₅ H ₂₈ O ₂	240.21	240.38	H+	241.2178	80-04-6	85656		84°C	ポリエステル樹脂原料
PTMAモノマー	PTMA Monomer	C ₁₈ H ₂₂ N ₂ O ₃	240.16	240.32	H+	241.1678	15051-46-4	8085282			モノマー類

⑤ ChemSpider で構造式を確認可能

ChemSpider Search and share chemistry

Found 1 result
Search term: 91960 (Found by CSID)

O-Ethylbenzoïn
Molecular Formula: C₁₆H₁₆O₂
Average mass: 240.297 Da
Molecular mass: 240.115036 Da

[Compound Search を活用した定性の流れ]

*その他の定性結果: m/z167 tert-ブチルヒドロキノン (m/z184 NH₄ アダクト)、m/z258 ベンゾインエチルエーテルの NH₄ アダクト、m/z338 エルカ酸アミド