

# シングル四重極 LC/MS を用いた ウイスキー中フェノール化合物の 分析



## Authors

野田 莉帆

アジレント・テクノロジー  
株式会社

## 要旨

近年、ウイスキーが再び注目を浴びています。ウイスキーの製造では、熟成という工程を経ますが、熟成の方法や場所が味に大きく影響を及ぼすとされます。熟成の指標の一つとしてフェノール化合物が用いられます。

本アプリケーションノートでは、ウイスキーに含まれるとされるフェノール化合物 10 種を一斉分析した例を紹介します。

Key word： 食品

## システム

Agilent InfinityLab LC/MSD システム  
1260 Infinity II クォータナリポンプ (G7111B)  
1260 Infinity II バイアルサンプラ (G7129A)  
1260 Infinity II カラム恒温槽 (G7130A)  
1260 Infinity II ダイオードアレイ検出器(G7117C)  
InfinityLab LC/MSD (G6125B)  
OpenLab CDS ChemStation C 01.08

## 分析条件

表1. 分析条件

LC	
カラム	Agilent ZORBAX SB-Aq 3.0× 100 mm, 1.8µm, P/N 858700-314
カラム温度	45°C
流速	0.7 mL/min
注入量	5 µL
移動相	A: 0.1% ギ酸水溶液 B: アセトニトリル
%B 組成	7%(0 min) → 18% (15 min)
MSD	
イオン化	ESI-Positive
ドライガス	13 L at 350°C
ネブライザ 圧力	60 psi
キャピラリ 電圧	3000 V

## サンプル

市販のウイスキー 3種 (A: バーボン, B: スコッチ, C: カナディアン) を0.1%ギ酸、20%アセトニトリル水溶液で希釈し、分析に供しました。

分析対象とした化合物を表2に示します。

表2. 対象化合物

No.	化合物名	モニター イオン	フラグメンタ 電圧 (V)
1	Gallic acid	171.1	80
2	Vanillic acid	169.1	100
3	Caffeic acid	181.0	80
4	Syringic acid	199.1	80
5	Vanillin	153.1	80
6	<i>p</i> -Coumaric acid	165.1	80
7	Syringic aldehyde	183.1	80
8	Scopoletin	193.0	140
9	Coniferyl aldehyde	179.1	100
10	Ellagic acid	303.0	160

## 結果

図1に100 µg/L 標準溶液のクロマトグラムを示します。全ての対象化合物が良好に分離していることを確認しました。

全ての化合物で、10 µg/L以上で検出可能であり、相関係数0.999以上\*と良好な値を示しました。各 250 µg/Lにおける面積相対標準偏差は3%以下、溶出時間相対標準偏差は0.15%以下と良好な再現性を確認しました。

市販ウイスキー中からフェノール化合物を検出・定量しました。定量結果を図2に示します。対象の8種のフェノール化合物が検出され、A,B,Cでそれぞれの含量や比率が異なることが確認されました。

例として、サンプル中の Syring Aldehyde のクロマトグラムを図3に示します。

\*濃度範囲 0.0125-1 mg/L, Scopoletinのみ 0.0125-0.25 mg/L

## まとめ

ウイスキーに含まれるフェノール化合物10種を一斉分析可能なメソッドを作成しました。Agilent ZORBAX SB-Aq カラムを使用することで、全ての化合物が良好に分離し、再現性も良好に検出されることを確認しました。

市販ウイスキーから、対象のフェノール化合物8種を検出し定量しました。

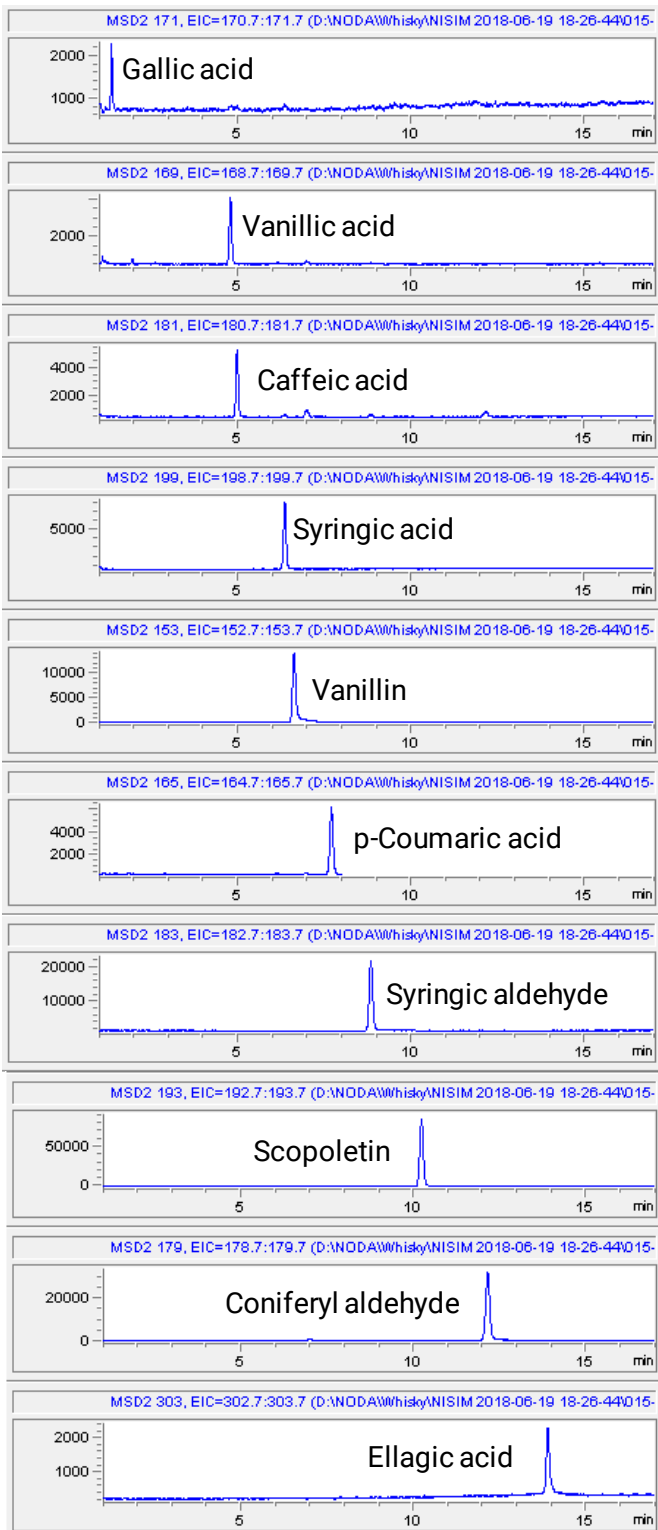


図1. 標準品各 100 µg/L 溶液の抽出イオンクロマトグラム

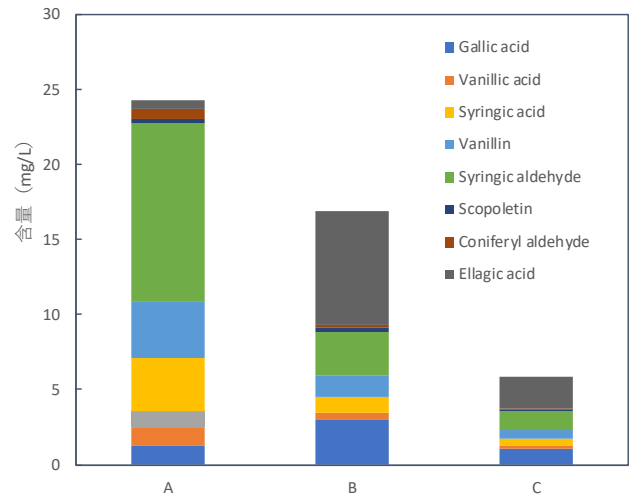


図2. 各ウイスキー中のフェノール化合物含量

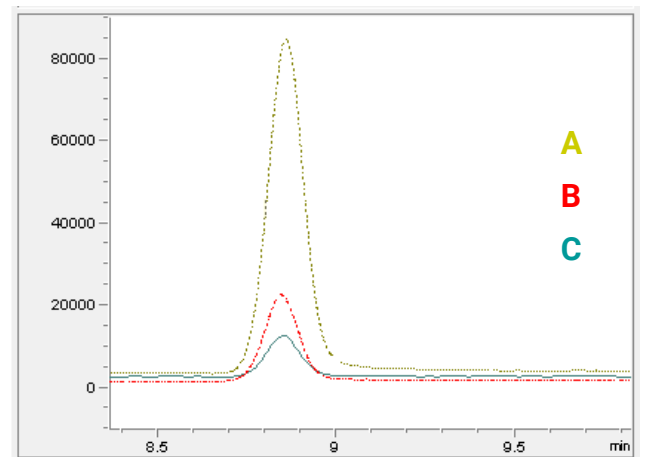


図3. 各サンプルの Syringic aldehyde クロマトグラム.

ホームページ

[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)

カスタマコンタクトセンタ

0120-477-111

[email\\_japan@agilent.com](mailto:email_japan@agilent.com)

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2018

Printed in Japan, October 4, 2018

LC-MS-201810ND-001

