



AnalyzerPro[®]ソフトウェアによる 農薬のGC-MSデータのデコンボリューション

ガスクロマトグラフィー - 質量分析(GC-MS)は、複雑なマトリックス中の有機化合物を同定、確認、および定量するための強力な分析技術である[1,2]。ガスクロマトグラフはマトリックス干渉から目的の分析物を分離し、質量分析計は分子のユニークなフラグメンテーションパターンに基づいて化合物を同定するために使用される。広範囲のライブラリ、例えばNIST/EPA/NIH質量スペクトルライブラリは、化合物の同一性を確かめるために生成された質量スペクトルを比較するために利用可能である。シングル四重極型質量分析計のような単位質量分解能の機器では、化合物のリテンションタイムとともにライブラリのマッチングスコアを使用して同一性を確認する。

複雑なマトリックス中の化合物を分析する場合、関心のある化合物の共溶出またはマトリックス干渉を伴う分析物の共溶出が一般的に発生する。図1は、2つの農薬が共溶出して単一のクロマトグラフピークを形成する例を示している。ピークの頂点で行われたNISTライブラリ検索は化合物をシメトリンと同定したが、実際のスペクトルと参照スペクトルを詳しく調べると、マススペクトルフラグメントの一部(m/z 184および129など)がライブラリスペクトルでは顕著に欠けていることがわかる。

図2に示すように、トータルイオンクロマトグラム(TIC)と比較して質量184と213のイオンクロマトグラム(EIC)を抽出すると、2つのピークに対して13.72分と13.74分の2つの異なる保持時間が存在する。2つの異なる化合物の存在13.72分の質量スペクトルを差し引きながら13.74分のスペクトルに対してライブラリ検索を実施することにより、化合物はフベリダゾールとして同定することができた。

手作業でピークをデコンボリューションするこのプロセスは面倒であり、細心の注意と注意を必要とする。そして分析物濃度がそれがノイズに隠されるほど低い場合には、ピークは同定され得ない。

SpectralWorksのAnalyzerProは、共溶出したクロマトグラフピークを自動的に複数のコンポーネントにデコンボリューションし、見つかったコンポーネントをライブラリ検索し、ターゲットコンポーネントのユーザー定義ライブラリを作成するように設計されている。

図3は、AnalyzerProによるシメトリンとフベリダゾールのピークの自動デコンボリューションと、2つの成分に対するNISTライブラリの検索結果を示している。

成分スペクトルは、ターゲット成分ライブラリに自動的に含めることができる。ターゲット成分ライブラリの検索とマッチングは、MatrixAnalyzerにおいて、製品認証および比較分析用に活用できるPCA分析といった、AnalyzerProでのさらなるデータ処理の基礎となっている。

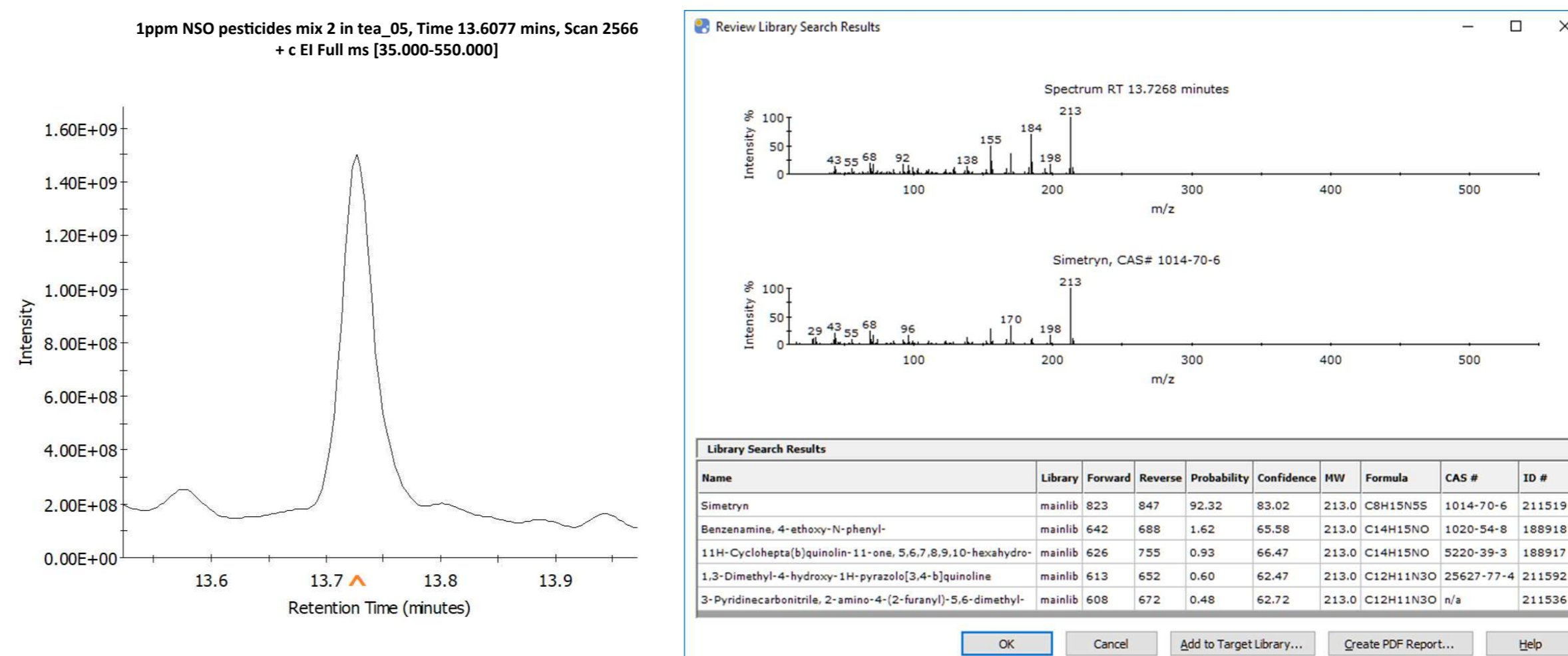


Figure 1. Chromatogram, Spectrum and Library Search result of Peak at 13.7 minutes in a tea matrix spiked with Herbicides.

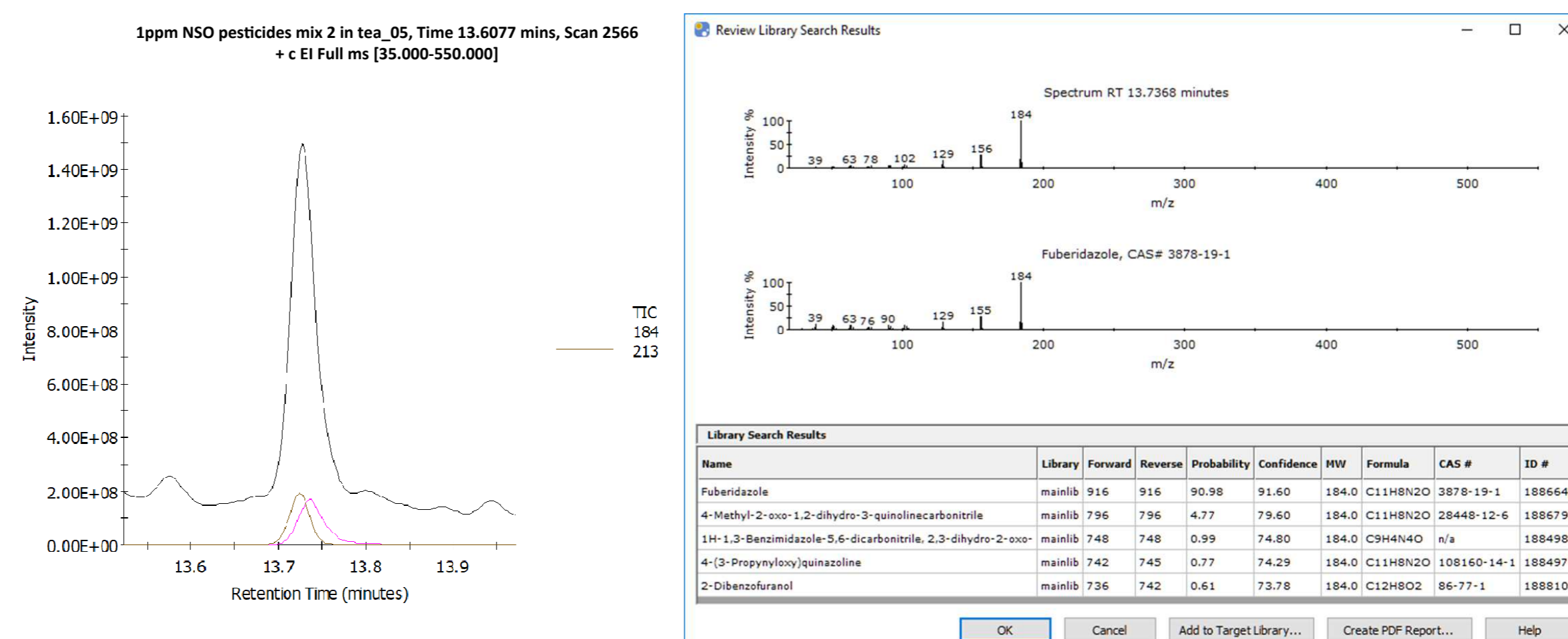


Figure 2. Extracted Ion Chromatograms of m/z 184 and m/z 213 and library search results of background subtracted spectrum at 13.74 minutes.

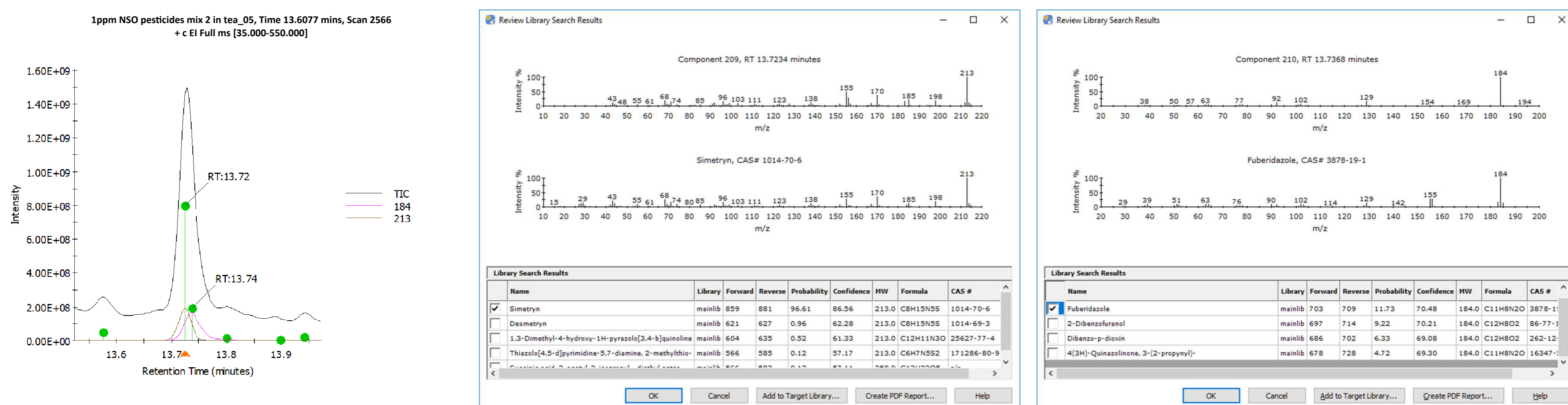


Figure 3. Automated deconvolution and library search results.

参考文献

1. Sparkman, O. D.; Penton, Z. E.; Kitson, F. G. Gas Chromatography and Mass Spectrometry – A Practical Guide; Academic Press, 2011.
2. Hübschmann, H.-J. Handbook of GC-MS; Wiley-VCH, 2015.

謝辞

ISQ 7000 GC-MSシステムのデータをご提供いただいたThermoFisher Scientific社に感謝します。

翻訳: インフォコム株式会社

