

Agilent 8700 LDIR ケミカルイメージングシステムによりサンプルデータを最大限に活用

マイクロプラスチック分析のデータ管理と解析オプション



はじめに

土壌、空気、水の汚染による脅威について十分な理解が進むにつれ、環境分析の分野においてマイクロプラスチックが大きな注目を集めています。マイクロプラスチックの化学物質の同定、数量、大きさ、形状は、研究者たちが分析サンプルで調査する主要な特性です。このような特性の幅広さを考慮すると、高スループットのサンプル分析にとって、効率で使いやすく、実用的な分析ソフトウェアが鍵となります。分析中に生成されるデータの量はマトリックスによって大きく異なりますが、数千の粒子からのデータが収集され、保存されることもあります。マイクロプラスチックの分析が確立されていく中で、通常の分析から生成される大量のデータと画像を管理できるということは、ますます重要性が高まっています。

Agilent 8700 LDIR ケミカルイメージングシステムと Agilent Clarity ソフトウェアを組み合わせた高速自動ワークフローは、他の外部ソフトウェアにデータをエクスポートしたり、余分な分析を実行したりすることなく、マイクロプラスチックの位置特定、画像化、測定、同定が可能です。つまり、ソフトウェアの初心者や分光分析手法の知識がほとんどないユーザーでも、サンプルを分析し、把握できるということです。また Clarity ソフトウェアは、より深い理解が必要とされる場合に結果を詳細に調査できるオプションも提供します。分かりやすいアーカイブプロセスにより、データを保存したり、任意のデータ保存場所に移動したりすることが可能です。この技術概要では、Clarity ソフトウェアがデータを提示する方法と、詳細な解析とデータ保存のためのオプションを紹介します。

一目で把握できる粒子分析結果

粒子分析が完了すると、Clarity ソフトウェアは解析しやすいフォーマットで結果を表示します。さらに処理する必要なく、サンプルの最も重要な情報を即座に得ることができます。

粒子データ

Clarity ソフトウェアでは、粒子分析パネルの Particles（粒子）タブに各粒子の概要が表示されます（図 1）。これには以下のような詳細情報が含まれます。

- 粒子の数
- 可視および IR イメージ
- 化学物質の同定
- ライブラリー一致に対する採取したスペクトルの重ね表示
- ヒットクオリティインデックス (HQI)
- サイズ情報

このタブで、統計データから個々の粒子を含めたり除外したり、粒子固有の情報を追加したりできます。

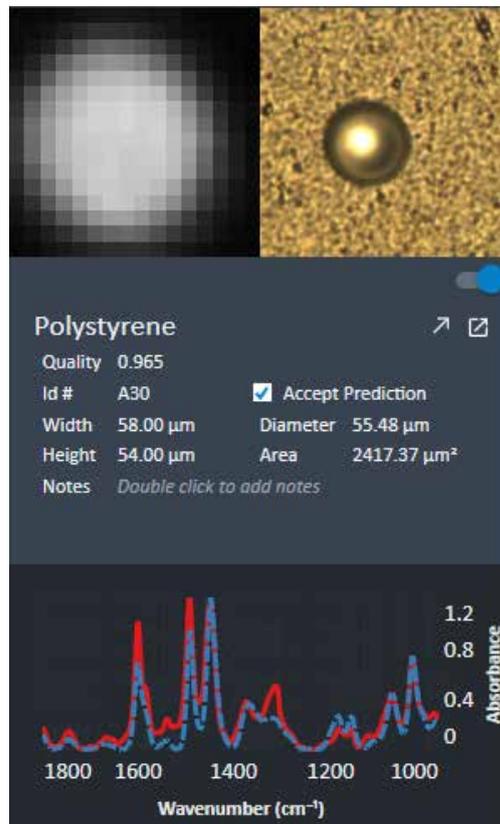


図 1. 粒子分析パネルの粒子データ

同定の詳細

Identifications（同定）タブに、粒子の同定結果のヒストグラムが表示されます（図 2）。このタブには次のデータが含まれます。

- 共通性の最も高い同定から最も低い同定の順序で示されたヒストグラム
- 各同定の比率
- 各同定の粒子数

また、イメージ上の特定の粒子を単色で強調表示し、サンプルにおける粒子同定の空間的分布を視覚的に示すことも可能です。

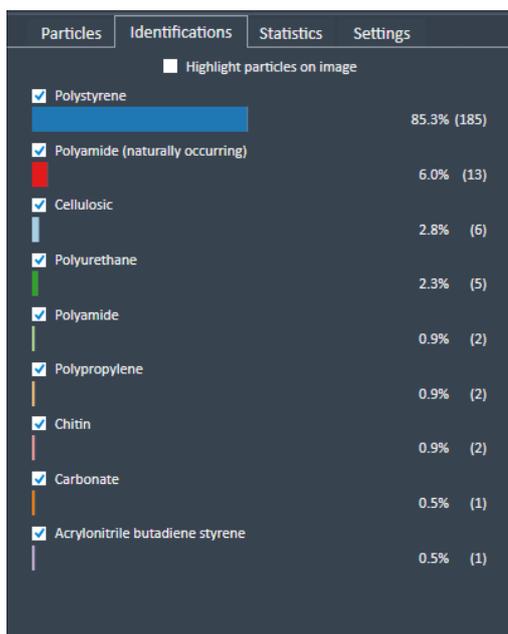


図 2. 同定の詳細

粒子径の分布

Statistics (統計) タブには粒子径分布のヒストグラムが表示されます (図 3)。粒子カウントは個別に、またはユーザー定義のカテゴリで表示させることができます。ヒストグラムに表示される粒子同定をカスタマイズし、特定の粒子タイプの粒子径分布を示すことが可能です。

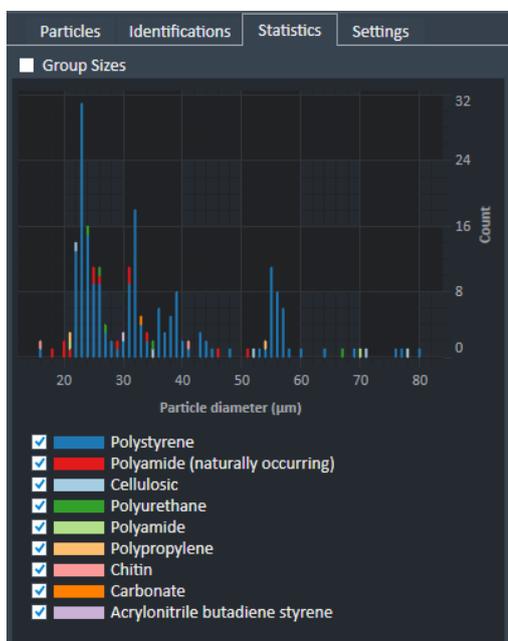


図 3. 粒子径の分布を示した統計表

粒子スペクトル

Spectral Viewer (スペクトルビューワ) ウィンドウには粒子分析中に採取されたすべてのスペクトルが表示され、該当の粒子に関連付けられるよう、スペクトルに自動で名前が付けられます。このウィンドウ (図 4) では、得られたスペクトルをライブラリスペクトルに対して比較・照合できるほか、複数の分解能で表示させたり、数理的に変換したり、他の収集スペクトルに対して比較したり、平均化したり、差し引いたりすることが可能です。

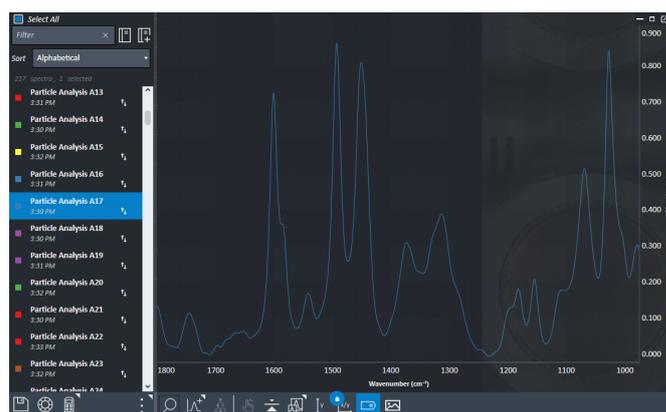


図 4. Spectral Viewer (スペクトルビューワ) ウィンドウ

サンプルデータを最大限に活用

粒子分析データを取得したら、Clarity ソフトウェア内で再分析することができます。これは、機器に接続されている PC や、Clarity ソフトウェアのインストール時に自動で搭載される Clarity Viewer アプリケーション経由で別の PC で実行できます。エクスポートされたデータファイルを他の Clarity 搭載機器にインポートし、機器 PC と同じように表示させることが可能です。

再解析

粒子分析で粒子が同定されると、1 つのスペクトルライブラリに対して照合されます。採取された粒子を更新済みのライブラリやまったく別のライブラリと照合したい場合は、メソッドを再解析することで行うことができます。これにより新規メソッドが作成され、新たに選択されたライブラリを使用して、メソッドですべての粒子が再度照合されます。この機能に関する詳細は、こちらのアプリケーションノートを参照してください。

カスタム照合

粒子分析ワークフローでは自動で、それぞれの粒子に対し、最高の HQI の同定を関連付けます。しかし、インポートされたライブラリから上位 5 つの一致を検討し、該当の粒子と一致するものを手動で割り当てることもできます。次にこの粒子は、Clarity の結果ウィンドウおよびエクスポートされた結果の両方で、ユーザー定義の粒子一致としてタグ付けされます (図 5)。

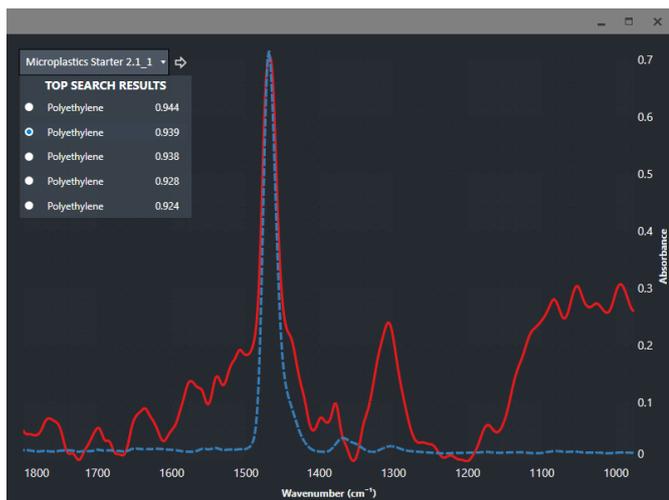


図 5. ユーザー定義の粒子同定

サンプルのエクスポートとアーカイブ

Clarity ソフトウェアでは、データベースとソフトウェア固有のスペクトルファイルを組み合わせたフォーマットでデータが保存されます。Clarity のホームページにある Export (エクスポート) および Archive (アーカイブ) 機能を使用して、これらのデータを管理できます (図 6)。サンプルをエクスポートすると、他の PC に搭載された Clarity ソフトウェアのインスタンスにインポート可能なファイルが作成され、ラボ以外の場所でより詳しく参照したり解析したりすることが可能です。

アーカイブでは一度に 1 つ以上のサンプルをエクスポートできます。サンプルはその後 Clarity ホームページと Clarity データフォルダから削除されます。これによって、Clarity データドライブがいっぱいにならず、ユーザーは自分の安全なストレージソリューションを使用できます。サンプルは個々にアーカイブされ、サンプル名でラベル付けされます。したがって、データを後で検索して参照する必要がある場合には、サンプルを同じ PC や他の PC の Clarity ソフトウェアにインポートして戻すことができます。サンプルのアーカイブにかかる時間はサンプルのサイズによって決まります。一般的に、1 GB のサンプルファイル (約 5,000 個の粒子のデータを表す) の場合で 30 分かかります。

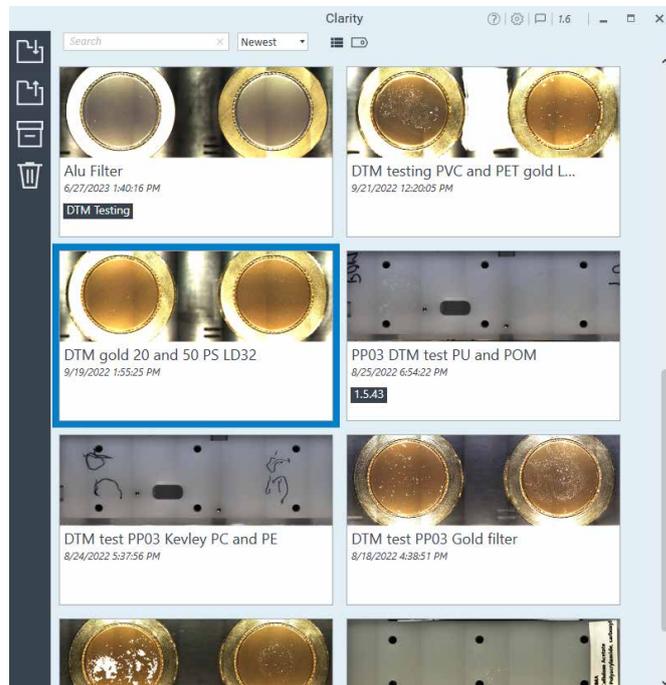


図 6. サンプル管理のための Clarity ホームウィンドウ

機器 PC 以外の PC でサンプルを参照し分析する場合は、該当の PC の仕様が表 1 とほぼ同等であることが推奨されます。

表 1. データ分析に推奨の PC 仕様

仕様	推奨
RAM	32 GB
CPU	3.60 GHz
グラフィックスカード	専用 GPU 推奨

他のフォーマットへのデータのエクスポート

さらなる再処理や、特定のデータ表示スタイルが必要な場合、Clarity ソフトウェアでは、さまざまな一般的なフォーマットで粒子データ、イメージ、スペクトルをエクスポートできます。

粒子データ

各分析メソッドの粒子データは、該当のメソッドウィンドウの Particle (粒子) タブからエクスポートできます。エクスポートすると、粒子名、同定情報、ヒットクオリティ、サイズデータ、メモを含む Microsoft Excel または CSV フォーマットファイルが生成されます。これらのデータには、「ISO/DIS 16094-2 Water Quality: Analysis of Microplastic in Water」や「Policy Handbook for Testing and Reporting Microplastics in Drinking Water」(California Water Boards 発行) など、発行済み、または開発中のメソッドで求められる結果が含まれます。

画像

粒子を確認するために生成される高分解能 IR イメージ (図 7) は、png、CSV、envi、PDF 等、複数のフォーマットで保存できます。特定された粒子の周囲に境界線を追加したり、すべての粒子を強調表示・色付けしたり、またはいずれの処理も追加したりせず、イメージを保存できます。Settings (設定) タブの **Save Images (イメージを保存) チェックボックス** を選択し、粒子データをエクスポートするだけで、個別の粒子の IR および高倍率可視イメージをエクスポートできます。これにより、各粒子に対し、エクスポートされた粒子データとイメージの両方が含まれたフォルダが生成され、粒子 ID 番号でラベル付けされます。

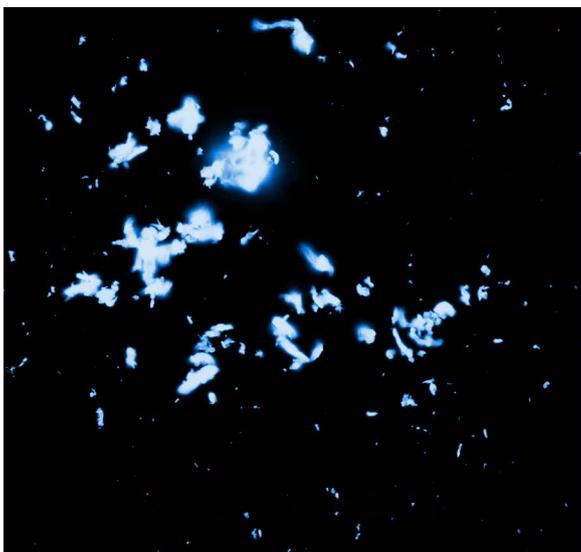


図 7. 粒子の確認に使用される IR イメージ

スペクトル

粒子スペクトルは、さらに詳細な解析のために CSV または Excel スプレッドシートとしてエクスポートできます。この方法で複数のスペクトルをエクスポートすると、それぞれのスペクトルに対し 2 つの列 (波数および強度) が設定された単一の Excel スプレッドシートが作成されます。スペクトルのイメージは、Spectral Viewer (スペクトルビューワ) ウィンドウからも簡単に保存できます (図 8)。

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンター

0120-477-111

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。

DE62570785

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2024

Printed in Japan, January 16, 2024

5994-7001JAJP

Bio-Rad

Clarity ソフトウェアは、粒子分析や Spectral Viewer (スペクトルビューワ) から Bio-Rad Laboratories KnowItAll 分析ソフトウェアにスペクトルデータを自動でインポートする機能を備えています。

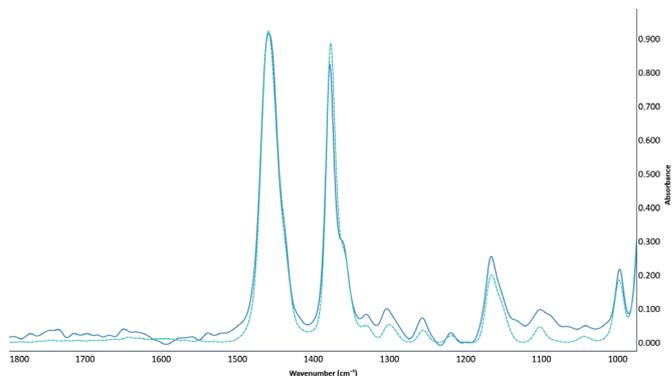


図 8. Spectral Viewer (スペクトルビューワ) ウィンドウから保存された取得スペクトルのイメージ

結論

Agilent 8700 LDIR ケミカルイメージングシステムと Agilent Clarity ソフトウェアは、マイクロプラスチックの検出と同定のための、包括的な完全自動化ワークフローを実現します。また、このワークフローで生成されたデータは、既存または新規の標準化検査方法の要件に対応した、明瞭で使いやすいフォーマットで表示されます。分光分析の経験のないユーザーでも、サンプルを即座に把握できます。同様に重要なのは、マイクロプラスチック分析で通常生成される、大量のデータを管理できるという点です。Clarity は直感的なデータアーカイブおよびエクスポートオプションを備えており、詳細な解析のために、またはストレージスペースを解放するために、サンプルとサンプルデータを機器 PC からユーザー定義の安全な保管場所に転送できます。さらに解析が必要な場合は、さまざまな種類の一般的なフォーマットで Clarity データをエクスポートできます。8700 LDIR はマイクロプラスチック分析をスピーディかつ簡単にするとともに、効率性を向上させます。

詳細情報

- Agilent 8700 LDIR ケミカルイメージングシステム
- Agilent Clarity ソフトウェア
- マイクロプラスチック技術の FAQ
- 水中のマイクロプラスチック分析