

Agilent 多変量解析ソフト (Mass Profiler Professional) を用いた 7700 シリーズ ICP-MS のデータ評価

質量分析データ解析

質量分析 (MS) を使用すれば、それぞれのサンプルから多くのデータ (質量数情報) を得ることができます。個々のサンプルの元素分析において効果的なものは明らかですが、一方、サンプル間の分類および差異の識別に利用することもできます。このようなサンプルの判別は、以下のような多くのアプリケーションで重要になります。

- 食品原産地の特定
- 食品、医薬品、臨床ラボにおけるコンプライアンステスト
- 産業プロセスのトレンド分析 (良品、不良品解析など)
- 法医学分析
- 汚染モニタリング

Mass Profiler Professional

アジレントの Mass Profiler Professional (MPP) ソフトウェアは、解釈が簡単な幅広いグラフィックプロットを使用して、複雑な質量分析データの比較、解釈、表示を可能にするパワフルな統合型のケモメトリックスパッケージです。MPP は、ICP-MS、LC/MS、CE/MS、GC/MS などのすべてのアジレント質量分析データに対応しています。また一定の Format にすれば、CSV file からデータを読みこむことも可能ですので、汎用性もあります。

複雑なデータの処理を簡略化できる幅広い機能によって、統計の専門家でなくても以下のような高度な統計機能を簡単に利用できます。

- 多変量 (測定した元素の数) データを少数の変量に絞り込む主成分分析 (Principal Component Analysis、以下 PCA と略)
- 類似サンプルを識別可能にするクラスタ分析など、データを処理および表示できる幅広い統計モデル
- ICP-MS で得られた元素濃度情報から、種々の解析を行うにあたり、質のいい元素を選別して、元素数を絞り込むフィルタ機能 (T 検定、グループ間の平均値の差、元素濃度のばらつきなどを指定して元素の選別を行う)
- 判別分析機能 など

7700 シリーズ ICP-MS によるデータ解釈

Agilent 7700 シリーズ ICP-MS は、最適なハードウェア設計をされた He モードの効果的な多原子イオン干渉除去機構により、複雑なマトリクス試料でも、従来の ICP-MS でしばしば問題になっていた多原子イオン干渉が大幅に低減できています。また、定量分析の際、半定量も同時に行う QuickScan という独特な機能があります。7700 ICP-MS の He モードを使用して得られた信頼性の高い全質量スペクトルデータは、MPP の分析に最適です。

MPP で提供されるさまざまな統計ツールを適用すると、生データのみからは簡単に識別できない予想外の関係やトレンドが明らかになる場合があります。例えば、食品の産地判別や、部品の良品不良品の判別などがあります。

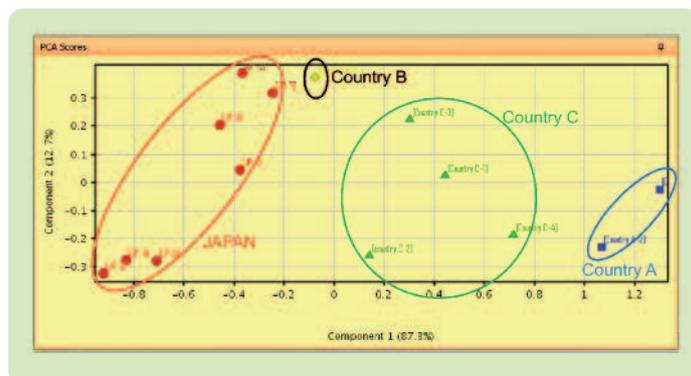


図 1. 異なる国から採取した米サンプルの PCA スコアプロット

図 1 と図 2 は、異なる国から採取した米サンプルの ICP-MS による半定量分析結果を基に、2 つの異なる MPP の解釈手法を示しています。図 1 は PCA のスコアプロットで、日本 (Japan) の米サンプルは、Country A および Country C のサンプルと容易に区別できていることがわかります。また、Country B の米サンプルは、Japan サンプルの米と PCA スコアが極めて似ています。この関係は、図 2 のクラスタ分析 (階層プロット) でも確認されています。クラスタ分析はサンプルの素性が全くわからない場合でも、MPP が各サンプルの元素濃度より、類似性のあるサンプルを階層毎に分類しますので、未知サンプル試料のグループ分けをすることが可能になります。この図では、Country B サンプルは、Japan サンプルと同じグループに分類されています。Country C-4 サンプルも PCA プロットに示されている関係からわかるように、Country A サンプルと同じグループに分類されています。



図 2. MPP クラスタ分析 (元素組成の類似性のレベルに基づいて分類)

MPP および ICP-MS データ

複雑なマトリクス試料でも、7700 シリーズ ICP-MS の He モードは優れた多原子イオン干渉除去能力を有するため、信頼性のある結果が得られます。全質量数スペクトル分析による半定量結果 (定量結果も含む) と MPP とを組み合わせることにより、分析時間は極めて短時間で、しかも複雑な多元素情報の解釈を統計解析に基づいて、簡単な操作で視覚的にわかりやすい形でサンプル間の関係を把握することができます。

詳細については、www.agilent.com/chem/icpms:jp をご覧ください。

