

# 強力なデータ処理ツール Agilent SureMass

## 技術概要

### 概要

クロマトグラフィーの共溶出が生じる複雑な混合物中の化学成分を抽出し特定するために、フルスペクトル GC/MS データには従来のマニュアル分析またはデコンボリューションアルゴリズムが必要とされてきました。デコンボリューションアルゴリズムを用いれば、分析困難なクロマトグラフィー条件下での微量濃度成分も測定することができます。しかし、これらのアルゴリズムは、標準分解能スキャン質量分析システム (例: 四重極 MS) 用に最適化されていることが多く、飛行時間型 (TOF) などの高分解能フルスペクトル質量分析システムでは最適な結果が得られない場合があります。この技術概要では、化学成分検出のための新たなデータ処理アルゴリズム (SureMass) について記述します。SureMass はアジレントの TOF ベース MS システムの高分解能プロファイル MS データ専用に設計されており、7200 シリーズ GC/Q-TOF プラットフォームで使用することができます。



**Agilent Technologies**

## はじめに

デコンボリューション法は、抽出イオンクロマトグラム (EIC) のリテンションタイムと溶出プロファイルマッチングに基づいており、今後も GC/MS ユーザーにとってきわめて強力なツールです (図 1)。これらのデータ処理法は GC 四重極質量分析装置 (GC/MSD) のスキャンにより生成されたスペクトルデータの処理に最適です。こうしたデコンボリューションツールは GC/MSD システムを用いる多くのラボでは珍しいものではありません。

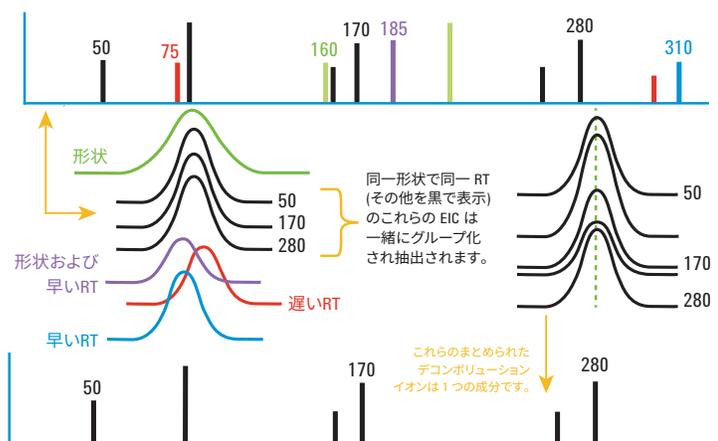


図 1. 時間およびプロファイルベースのデコンボリューション

この確立されたデコンボリューション法は、その分析力にもかかわらず、GC/MSD などの整数質量スキャン機器のデータ用に主に設計され最適化されています。Agilent 7200 シリーズ GC/Q-TOF システムなどの高分解能の精密質量機器のデータは、この従来型アプローチでは最大の効果を得られないこともあります。処理スピード、成分検出能力、および繰り返し注入での再現性はすべて、複雑なデータタイプに近似処理を行う場合に影響を受けます。高分解能の精密質量データのクロマトグラフィーの詳細および広範なスペクトルの情報の豊富さによって、EIC ベースの成分検出の性能限界が試されます。GC/Q-TOF が生成した高分解能の精密質量のデータを有効活用できるように、アジレントは特性の検出およびデコンボリューション用の革新的なデータ処理アルゴリズムを開発しました。

Agilent SureMass は、7200 シリーズ GC/Q-TOF システムによって生成されるような高分解能 MS プロファイルデータ専用設計された新たな化学的特性検出アルゴリズムです。この高度な手法は、フルスペクトルで高分解能の TOF MS のプロファイルデータを EIC の 1 セットとしてではなく、連続的な三次元アレイ (リテンションタイム、 $m/z$ 、およびアバンダンス) として処理します。持続的な三次元スペクトルの隆起および関連する化学的特性に基づいて、SureMass はクロマトグラフィーの時間目盛上で変化する MS 検出特性に対応するよう設計されています。これは SureMass の重要な側面の 1 つです。従来型の (整数質量) デコンボリューションにアバンダンス補正を組み込んで、スキャン質量分析計に伴うスペクトルの歪みに対応するのと同様に、SureMass には実験条件の変化による MS 測定特性 ( $m/z$  値、強度) の変化に適応する能力があります。データ処理アルゴリズムを設計する際に実用的な機器性能特性を考慮することによって、生成される結果を従来のものより改善させることができます。

TOF MS の性能特性は取得したデータに明確な影響を及ぼします。これは三次元の TOF データファイル全体を見る場合に明らかになります。化学的特性は持続的な隆起シグナルに沿った頂点として目視可能です。こうした隆起は時間領域に沿って存在し、成分の溶出中に上方へ伸びて特性を表します。隆起は低レベルの化学信号から放射されます。注目すべきことに、これらの隆起は  $m/z$  領域において必ずしも静的ではありません。データ取り込み期間全体における実験条件の変化により、 $m/z$  測定値に追跡可能な変化が生じる場合があります。SureMass を使えば、次に示すこうした追跡可能なパターンに従う隆起を抽出することができます。

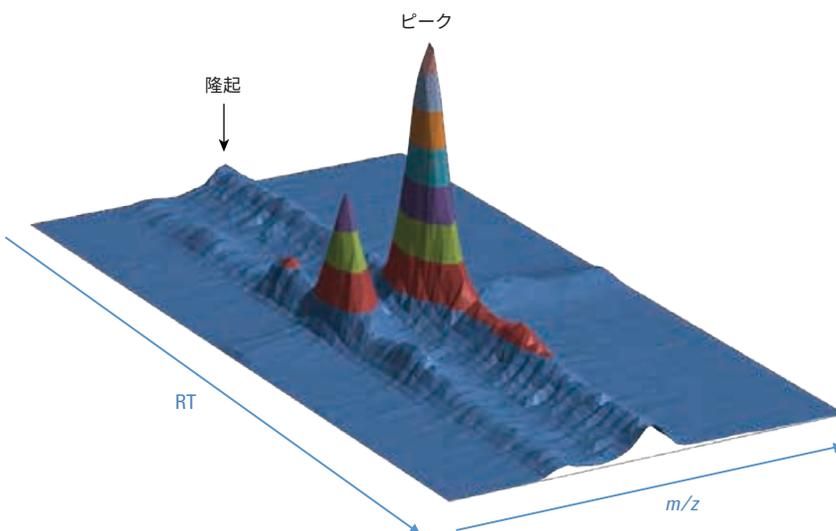


図 2. Agilent SureMass 三次元データ処理

## 抽出 SureMass クロマトグラム (ESM)

スペクトルの隆起の動的な性質も、関連する化学的特性にあてはまります。この特性を利用するために、SureMass はその溶出プロファイル中の質量割り当てを変化させて化学的特性の可変シグナル抽出を行います。このようにして、抽出 SureMass クロマトグラム (ESM) を生成することができます。ESM は明確な可変隆起およびその関連する化学的特性に相当するものであり、従来のデコンボリューションで EIC を用いて行われる静的な質量範囲抽出では必ずしもありません。ESM は三次元のシグナルから抽出、検出された化学的特性の二次元クロマトグラフィー表示です。

ESM に割り当てられる  $m/z$  値は、経験的に定められたアバundance閾値未満としてデータ処理によって特性解析されたスペクトルによる  $m/z$  値のアバundance加重平均として計算されます。実験条件の変化による  $m/z$  割り当てにおける不一致は最低限に抑えられ、 $m/z$  真度をクロマトグラフィーの複雑さやシグナル強度にかかわらず向上させることができます。

## リニアダイナミックレンジ (直線性)

化学成分のシグナルを正確に抽出する能力以外にも、SureMass は実験条件のために真のピークアバundanceが不明瞭な場合にシグナル強度を補間することができます。GC/MS 分析は通常、5 ~ 20 Hz のスペクトル取得レートで行われます。実際の選択レートはクロマトグラフィーのピーク幅によって異なり、適切な特性解析のために分離ピーク全域でおおよそ 10 ~ 20 のデータポイントを達成するレートが通常は選択されます。これらのセグメント間の真のピークアバundanceが不明瞭な場合でも、この取得レートによって、十分な間隔でピークの上昇端および下降端にデータポイントを生成し、ピーク溶出プロファイルの該当部分のピーク曲率をモデル化することができます。その後、この上昇および下降部分は経験的に得た不分離ピークモデルに適合させることができ、クロマトグラフィーの極端なアバundance期間においても、完全な分離ピークプロファイルと強度特性解析を得ることができます。この手法は SureMass に採用されており、実験条件によって ESM シグナルがあらかじめ定めたアバundanceレベルを超過する場合に使用されます。そのため、分析用のこのリニアダイナミックレンジは従来のシグナル抽出法よりも拡張することができます。SureMass では多くの場合、リニアダイナミックレンジを桁違いに拡張することも可能です。この機能強化によって、スペクトルライブラリ照合が改善されることから、定量真度が高まり、同定の信頼性を向上させることができます。

## 感度および精度

従来のデコンボリューション法は、有意で複雑なバックグラウンドの存在下で低レベルのシグナルを検出し抽出できるよう設計されています。SureMass では、高分解能データ用にこの能力を進化させており、標準 EIC 抽出では通常は不明瞭になる低アバンドンスレベルまで隆起溶出プロファイルを追跡できます。こうした低レベルの隆起および関連するピークを抽出することで、微量濃度成分の検出感度を高めることができます。さらに、このアプローチの場合、ESM シグナルには従来の EIC よりも干渉からのノイズが低くなり、クロマトグラムがよりクリーンに抽出されます。低シグナルレベルでは、このシグナル品質により、繰り返し注入における再現性 (ピーク面積/高さ %RSD) が改善されます。

## データ処理時間

SureMass が従来のデータ処理法よりもさらに進化している点は、必要とされる計算時間が大幅に短縮されたことです。スペクトルおよびクロマトグラフィーの豊富なデータを、検出済みの隆起およびピークの関連情報に整理することで、SureMass を用いたデータファイル処理は、標準の質量デコンボリューションアルゴリズムよりはるかに効率的になります。同等の分析の場合、処理スピードは従来の手法と比較しておよそ 100 倍の向上が可能です。SureMass はデータ取得後の手法として適用できるため、過去に取得した GC/Q-TOF のデータセットにこのアルゴリズムを用いることができます。

## 結論

Agilent SureMass は新たなデータ処理法を用いることにより、Agilent 7200 シリーズ GC/Q-TOF でこれまで利用可能であったあらゆる手法よりも、高い感度および精度、優れた再現性で、広いダイナミックレンジ全体にわたり短時間で成分のピークを検出し抽出することができます。この新機能を活用することで、GC/Q-TOF によって生成された情報豊富で高分解能の MS プロファイルデータからの分析値を、定量、定性、探索ワークフローにおいて、かつて到達できなかったレベルに引き上げることができます。7200 シリーズ GC/Q-TOF ユーザーは、SureMass を各アプリケーション内のシンプルなデータ解析メソッドパラメータとして、Agilent MassHunter 定量分析 B.08.00 および Unknowns Analysis B.08.00 で利用できます。

ホームページ

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

カスタムコンタクトセンタ

**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いません。  
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. 2017

Printed in Japan, May 1, 2017

5991-8048JAJP



**Agilent Technologies**