[TECHNOLOGY BRIEF]

TOFスクリーニング分析において狭いマス抽出幅がもたらすベネフィット

目標

TOF/MSを適用した質量高分解能よる選択性により、信頼性を高めた環境水中の残留農薬スクリーニング法の確立

背景

環境監視分野において、TOFの技術を用いたスクリーニング分析手法が最近注目されています。TOFのフルスキャンデータ取り込み手法は、再分析を必要とせず、分析時にターゲットとしなかった物質を確認する事ができる網羅的なデータ取り込み方法です。つまり、従来のタンデム四重極型質量分析計を用いたターゲット分析（MRM取り込み）と比べて、予想外の化合物の検討において非常に効果があります。

世界的に増加する食料の需要に対応し、食料を安定供給するために農薬や類似化合物が使用されています。ヒトの健康面でも、環境水中の農薬のスクリーニング分析が必要とされています。作物の収穫効率を向上させるために農薬を使用すると、農薬は作物だけでなく土壌や水路にも侵出し、その結果植物および野生生物に影響を及ぼします。

水の品質を維持し、水生生態系の保全を図る場合、分析者は調査する水の含有成分全体を把握しなければなりません。

TOF/MSスクリーニング法は、このような分析において、非常に効果を発揮する分析手法です。また、汚染化合物を正確に同定するためには、信頼性の高いデータを取得する必要があります。極めて狭いマス抽出幅を用いてデータ解析を実行すると、誤同定を軽減し、リスクが最小化されます。

Xevo G2 QTofの非常に安定した精密質量測定技術は、擬陽性を最小限に抑えた精度の高い結果を得る事ができます

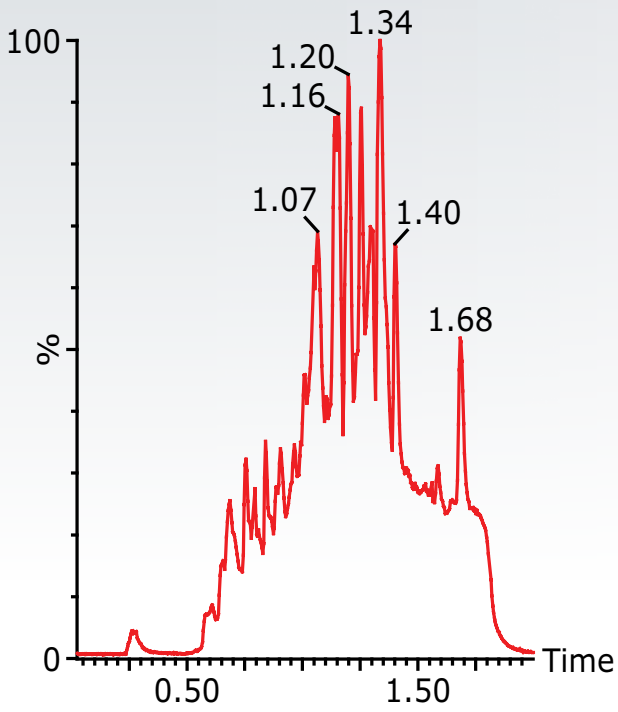

図1. 100 ng/L相当の103種農薬混合物をスパイクした家庭排水のマスクロマトグラム

Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

ソリューション

ウォーターズのACQUITY UPLC / Xevo™ G2 QTof MS分析システム、農薬スクリーニング用のデータベース、スクリーニング専用ソフトウェアPOSI±IVE™を用い測定から解析までを実行しました。また家庭排水のクリーンアップにはOASIS® HLB (SPE カートリッジ)を用いました。
分析には10 mM酢酸アンモニウム水溶液と、10 mM酢酸アンモニウム含有メタノール溶液の一般的なUPLC®グラジエント条件を用い、トータル分析時間はわずか2分です。

分析サンプルには、一般的に使用されている103種の農薬の混合物を、家庭排水に100 ng/L相当でスパイクしました。
図1にトータルイオンクロマトグラムを表示しました。2分という非常に短い分析時間の中で数多くの化合物が検出されているため複雑なクロマトグラムとなっています。

このような複雑なクロマトグラムから化合物を同定する場合は、ピークが正確に抽出され、同定されることが重要な課題となります。
ピーク抽出は、極めて狭いマス抽出幅を適用することによって、選択性を高めることができます。しかしこの技術を用いるためには、データが常に信頼性の高い精密質量精度で安定的に取り込まれる必要があります。

図2にXevo G2 QTof MSデータにおいて、狭いマス抽出幅が化合物の同定精度に及ぼす効果を示しました。この結果から、マス抽出幅を狭めることによりフェヌロン付近にある夾雑ピークをクロマトグラム上で排除することができ、ピークの同定の精度が向上しました。

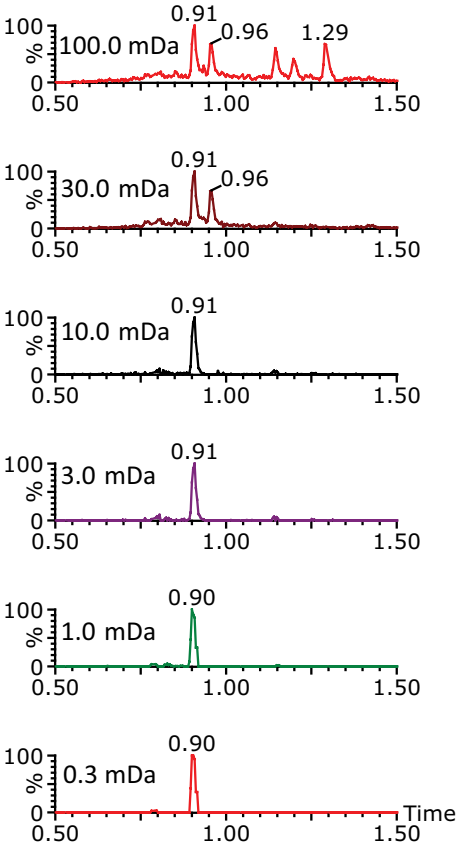

図2. 家庭排水中のフェヌロン m/z165.1028のマス抽出幅を変更することによる効果

まとめ

Oasis® HLB HLB (SPE カートリッジ)、マトリックスとの高速高分離を実現するACQUITY UPLC、高感度で安定な精密質量情報を提供する Xevo G2 QTof MS、専用ソフトウェアPOSI±IVEを用いた今回のシステムソリューションで、家庭排水中の広く除草剤として用いられている超微量レベルのフェヌロンを高感度で確認、同定を行う事ができました。
フェヌロンの同定には、非常に狭いマス抽出幅を適用することにより夾雑ピークを除去し、同定の精度を向上させる事ができました。
今回のデータにより、Xevo G2 QTof の測定における精密質量精度の安定性の実証と、擬陽性を抑えた同定能力の向上によるスクリーニング分析における効果を示すことができました。

Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

日本ウォーターズ株式会社 www.waters.co.jp
東京本社 〒140-0001 東京都品川区北品川1-3-12第 5 小池ビル
TEL 03-3471-7191 FAX 03-3471-7118
大阪支社 〒532-0011 大阪市淀川区西中島5-14-10 サムティ新大阪フロントビル 11F
TEL 06-6304-8888 FAX 06-6300-1734
ショールーム 東京 大阪
テクニカルセンター 東京 大阪 名古屋 福岡 静岡

Waters、ACQUITY UPLC、Oasis および UPLC は Waters Corporationの登録商標です。The Science of What's Possible、Xevo および POSI±IVE は Waters Corporationの登録商標です。その他すべての登録商標はそれぞれの所有者に帰属します。
©2010 Waters Corporation
April 2010 720003423JA LB-CP
10035 06A

このISO9001認証登録ロゴは、ウォーターズコーポレーションのものです。