

# Application Data Sheet

## No.98

### GC-MS

Gas Chromatograph Mass Spectrometer

## トランジション及びコリジョンエネルギーの自動最適化

Automatic Optimization of Transitions and Collision Energies

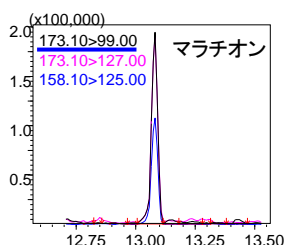
GC-MS/MSのMRMモードは、最適なトランジションとコリジョンエネルギー(CE)を決定する必要があります。しかし、トランジションを最適化する作業は煩雑で手間のかかる作業です。

GCMS-TQシリーズの制御ソフトウェアGCMSsolution(Ver.4.20以降)には、MRM最適化ツールが搭載されています。本データシートではMRM最適化ツールを用いたトランジションとCEの迅速な最適化手順をご紹介します。

### トランジションの最適化手順

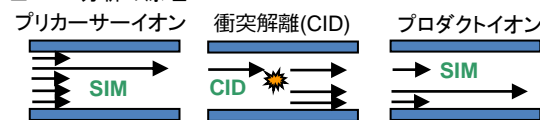
トランジションはプリカーサーイオンとプロダクトイオンの組み合わせです。GC-MS/MSのMRM分析をするには、プリカーサーイオンとプロダクトイオンの最適な組み合わせを決定しなければなりません。

#### トランジションについて



例としてマラチオンのMRMクロマトグラムを挙げます。“173.10>99.00”がトランジション、“173.10”がプリカーサーイオン、“99.00”がプロダクトイオンです。

#### MRM分析の原理



プリカーサーイオン<sup>1)</sup>: あるイオンから別のイオンが生成するとき、元のイオンを指す。親イオンと同じ。

プロダクトイオン<sup>1)</sup>: ある特定のイオンから生成したイオンを指す。

元のイオンをプリカーサーイオンという。娘イオンと同じ。

トランジションの最適化は以下の4つの手順で構成されます。MRM最適化ツールを用いれば、スキャンモードで採取したデータを解析するだけで、自動でトランジションを最適化できます。

**Step 1**  
スキャンモードのデータを採取し解析

手動

**Step 2**  
プロダクトイオンスキャンモードのメソッドファイルの作成

自動

**Step 3**  
プロダクトイオンスキャンモードでデータ採取

自動

**Step 4**  
トランジション及びその最適なCEを決定

自動

### Step 1: スキャンモードで採取したデータを解析する

まず、GCMSsolutionの[GCMS再解析]プログラムを起動し、Q3スキャンモードで採取したデータファイルを開きます。この時、各化合物が正しく同定されていることを確認します。



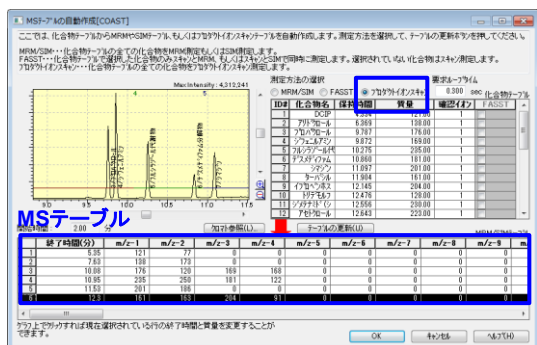
各化合物の質量と確認イオンがプリカーサーイオンに設定されます。MRM最適化ツールは、1つの化合物につき複数のプリカーサーイオンを用いたトランジションの最適化が行えます。

## Step 2: プロダクトイオンスキャンモードのメソッドファイルを作成する

各化合物を同定した後



アイコンをクリックすると、“MSテーブル”が自動で作成されます。



[プロダクトイオンスキャン]を選択すると、プロダクトイオンスキャンモードの“MSテーブル”が自動で作成されます。作成された“MSテーブル”はクロマトグラムを見ながら修正できます。“MSテーブル”に問題がなければ、プロダクトイオンスキャンモードのメソッドファイルが作成されます。

## Step 3: プロダクトイオンスキャンモードでデータを採取する

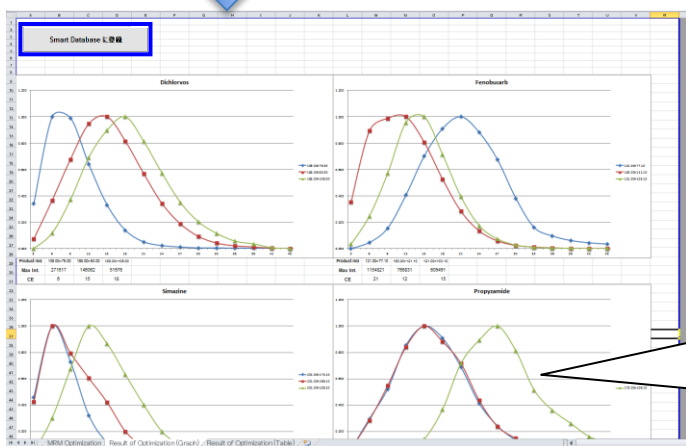


次に、プロダクトイオンスキャンモードのデータを採取します。MRM最適化ツールを用いれば、左図に示すパラメータを設定するだけで、CEの異なるメソッドファイルと、これらのメソッドファイルを登録したバッチファイルを自動で作成できます。作成したメソッドファイルを用いてデータ採取を開始します。

## Step 4: トランジション及びその最適なCEを決定する



最後に、トランジション及びその最適なCEを決定します。MRM最適化ツールを用いれば、プロダクトイオンスキャンのデータファイルを選択するだけで、トランジション及びその最適なCEを自動で決定できます。例として、MRM最適化ツールで最適化したトランジションとCEのグラフをFig. 1に示します。CEが高い精度で最適化されたことがわかります。



GCMS-TQシリーズは高速スキャン制御技術により、多成分のプロダクトイオンスキャン一斉分析が可能です。Fig. 1に示す通り、一斉分析でトランジション及びCEを最適化した場合でも、高い精度でCEが最適化されています。GC-MSのメソッドからGC-MS/MSへ移行する場合など、多成分のトランジション及びCEを最適化する場合に便利です。

Fig. 1 トランジションとCE

MRM最適化ツールで選択したトランジション及びCEは“Smart Database”に登録されます。“Smart Database”を用いることによって簡単にMRM分析メソッドを作成できます。“Smart Database”を用いたMRM分析メソッドの作成方法はアプリケーションデータシートNo.97で紹介します。

### 参考文献

- 1) 日本質量分析学会 マススペクトロメトリー関係用語集

**株式会社 島津製作所**

分析計測事業部 <http://www.an.shimadzu.co.jp/>

本資料の掲載情報に関する著作権は当社または原著者に帰属しており、権利者の事前の書面による許可なく、本資料を複製、転用、改ざん、販売等することはできません。掲載情報については十分検討を行っていますが、当社はその正確性や完全性を保証するものではありません。また、本資料の使用により生じたいかなる損害に対しても当社は一切責任を負いません。本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。