

# Application Data Sheet

## No. 101

## GC-MS

Gas Chromatograph Mass Spectrometer

# Smart Forensic Databaseを用いた全血中の薬毒物の分析 (2)

Analysis of toxicological substances in whole blood using the Smart Forensic Database (2)

「Smart Forensic Database」は、中毒事例の多い薬毒物201成分の保持指標、MRMトランジション、コリジョンエネルギー、定量/確認イオン比が登録されたMRMデータベースです。GCMS-TQ8040で搭載された「Smart MRM」を用いる事で、データベースから自動的にスキャン/MRM用とMRM用の分析メソッドを作成することができます。

本アプリケーションでは、「Smart Forensic Database」から作成したスキャン/MRM同時測定用メソッドを用いて全血試料を測定し、得られたスキャンデータを「GC/MS法薬毒物データベース」に適応した例を紹介します。

## GC/MS法薬毒物データベース

「GC/MS法薬毒物データベース」はスキャン分析用のデータベースで726化合物(1476種類)の薬毒物が登録されています。データベースには、薬毒物名、定量・確認イオン、保持指標と標準マススペクトルが登録されており、薬毒物の保持時間は、GCMSsolutionのAART機能により、n-アルカン混合標準試料の測定データを利用して、低沸点から高沸点までの成分を一括で正確に推測できます。登録されている定量・確認イオンのマスクロマトグラムにより、薬毒物の含有の有無を簡単に判断することができます。

## 前処理

全血試料の前処理はEXTrelut® NT3による液-液抽出法を用いました。採血した全血試料を酸性画分と塩基性画分用に、1mLずつはかり採り、それぞれ1mLのMilli-Q水で希釈しました。酸性画分は10%塩酸を用いてpH 5に調整し、塩基性画分は10%アンモニア水でpH 9に調整しました。各溶液をそれぞれEXTrelut® NT3に注ぎ、30分静置した後に、10mLのクロロホルム:イソプロパノール(3:1)混合溶液でそれぞれ溶出しました。その後、酸性画分と塩基性画分の抽出液を混ぜ合わせ、シリカゲルにて脱水後、窒素気流下で乾固し、200 µLのクロロホルム:イソプロパノール(3:1)混合溶液で再溶解しました。

## 分析条件

GC-MS/MSの分析条件はSmart Forensic Databaseに登録されている条件を利用しました(Table 1)。MRMの測定対象化合物はデータベースに登録されている201成分を設定したスキャン/MRM同時分析メソッドを作成しました。

Table 1 分析条件

GC-MS	: GCMS-TQ8040		
カラム	: Rxi®-5Sil MS (長さ30m, 0.25mm I.D., df=0.25 µm)		
ガラスインサート	: スプリットレスインサートウール入り (PN:221-48876-03)		
[GC]		[MS]	
気化室温度	: 260°C	インターフェース温度	: 280°C
カラムオープン温度	: 60°C(2分)→(10°C/分)→320°C(15分)	イオン源温度	: 200°C
注入モード	: スプリットレス	測定モード	: スキャン/MRM同時測定
キャリアガス制御	: 線速度 (45.6 cm/秒)	スキャンイベント時間	: 0.10秒
高圧注入	: 250kPa (1.5分)	スキャン質量範囲	: m/z 43 – 600
注入量	: 1 µL	スキャンスピード	: 10,000 u/秒
		MRMイベント時間	: 0.3秒
		合計ループタイム	: 0.4秒

## 分析結果

全血抽出試料をスキャン/MRM同時分析で測定し、スキャンデータについて「GC/MS法薬毒物データベース」を用いて解析した結果、カチノン類であるペンテドロンを同定することができました(Fig. 1)。スキャン/MRM同時分析を利用することで、MRMデータは「Smart Forensic Database」による中毒事例の多い薬毒物の高感度検出を行い、スキャンデータはマススペクトルを用いた同定確認や「GC/MS法薬毒物データベース」を利用した約1400種類の薬毒物のスクリーニングに利用することができます。

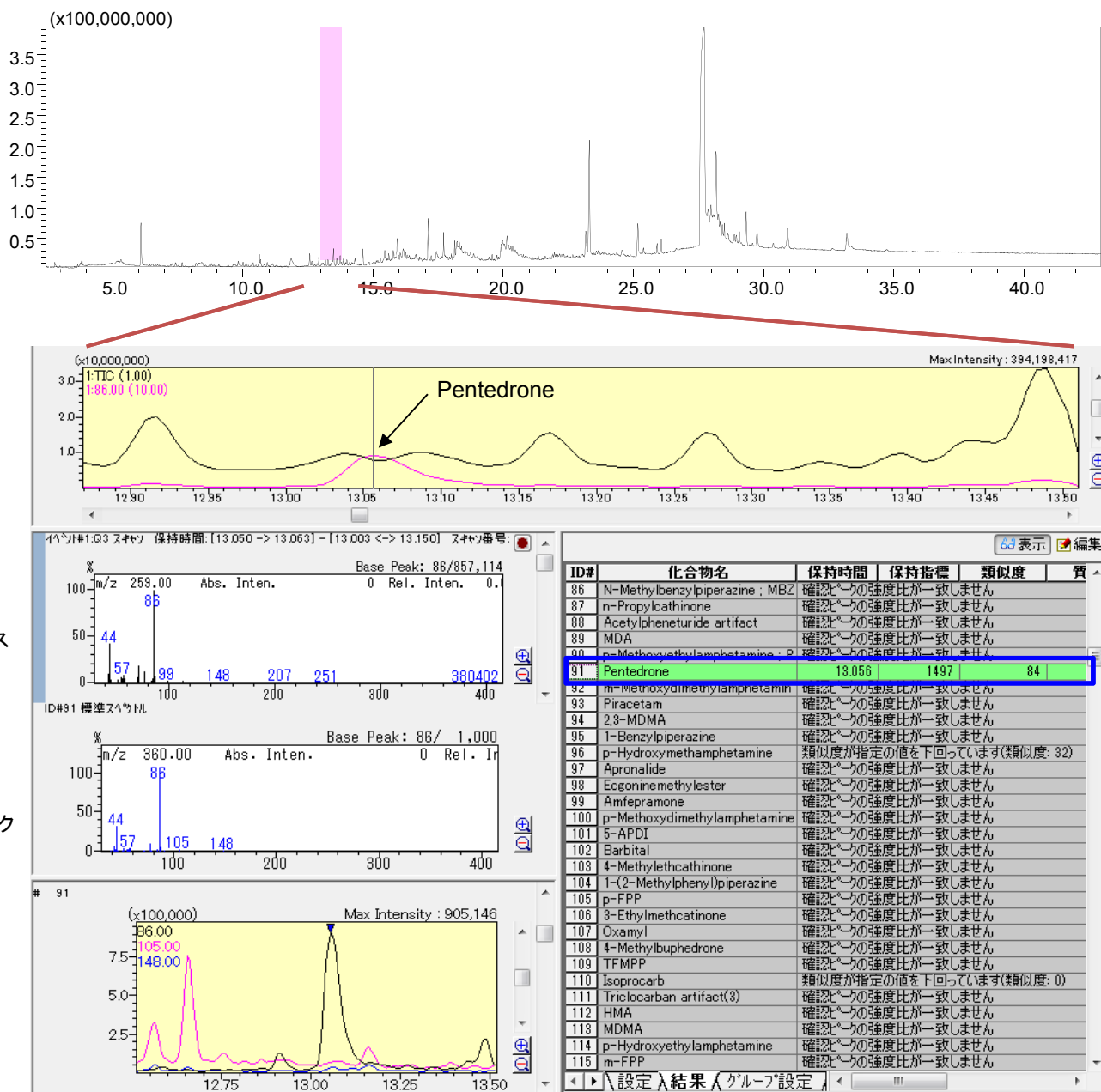


Fig. 1 全血試料のスキャンデータを「GC/MS法薬毒物データベース」を用いて解析した分析結果

本データは名古屋大学大学院医学系研究科 法医生命倫理学 財津桂先生の協力により採取しました。

## 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。