

GCMS-TQシリーズ用 薬毒物データベース
Forensic Database for GC-MS/MS Analysis

Smart Forensic Database Ver. 2

| シリアル番号 | タイプ | 検出モード | メソッド番号 | 化合物名 (J) | 保持時間 1 | 保持時間 | Cas番号 | コメント | イオン1 | | | |
|--------|--------|-------|--------|-----------------|--------|------|-------------|--------------------|------|-------------|----|--------|
| | | | | | | | | | タイプ | m/z | CE | 比率 |
| 1 | Target | MRM | 1 | バルプロ酸 | 1108 | | 99-66-1 | Psychotropic Drugs | T | 102.0>73.0 | 6 | 100.00 |
| 2 | Target | MRM | 1 | バルプロ酸-TMS | 1156 | | 0-00-0 | Psychotropic Drugs | T | 201.1>76.0 | 12 | 100.00 |
| 3 | Target | MRM | 1 | フェニチン | 1171 | | 122-09-8 | Drugs of Abuse | T | 134.0>117.0 | 9 | 100.00 |
| 4 | Target | MRM | 1 | プロムフェリル炭素分級物 | 1181 | | 0-00-0 | Psychotropic Drugs | T | 139.0>122.0 | 15 | 100.00 |
| 5 | Target | MRM | 1 | メタミソス | 1237 | | 10265-92-6 | Pesticides | T | 141.0>96.0 | 8 | 100.00 |
| 6 | Target | MRM | 1 | ジクロルボス | 1244 | | 62-73-7 | Pesticides | T | 185.0>93.0 | 14 | 100.00 |
| 7 | Target | MRM | 1 | エトスチミド | 1249 | | 77-67-8 | Psychotropic Drugs | T | 113.0>69.0 | 15 | 100.00 |
| 8 | Target | MRM | 1 | アンフェタミン-TFA | 1304 | | 0-00-0 | Drugs of Abuse | T | 140.1>69.0 | 24 | 100.00 |
| 9 | Target | MRM | 1 | アモキシシリン | 1359 | | 2078-54-8 | General Drugs | T | 178.1>163.1 | 12 | 100.00 |
| 10 | Target | MRM | 1 | プロモフェリル-TMS | 1391 | | 0-00-0 | General Drugs | T | 250.1>235.1 | 9 | 100.00 |
| 11 | Target | MRM | 1 | エフェドリン-TFA | 1391 | | 50-98-6 | Drugs of Abuse | T | 154.1>110.1 | 12 | 100.00 |
| 12 | Target | MRM | 1 | メタンフェタミン-TFA | 1413 | | 0-00-0 | Drugs of Abuse | T | 164.1>110.1 | 12 | 100.00 |
| 13 | Target | MRM | 1 | アセフェート | 1450 | | 0-00-0 | Drugs of Abuse | T | 164.1>110.1 | 12 | 100.00 |
| 14 | Target | MRM | 1 | メトホルマール | 1462 | | 30560-19-1 | Pesticides | T | 136.0>94.0 | 14 | 100.00 |
| 15 | Target | MRM | 1 | エタコナメチルエステル | 1503 | | 1129-41-5 | Pesticides | T | 108.0>77.0 | 24 | 100.00 |
| 16 | Target | MRM | 1 | アミノイソプロピルアセチル炭素 | 1503 | | 106293-60-1 | Drugs of Abuse | T | 96.0>81.0 | 18 | 100.00 |
| 17 | Target | MRM | 1 | | 1503 | | 528-92-7 | Psychotropic Drugs | T | 141.0>81.0 | 6 | 100.00 |

GC-MS/MSによる生体試料中薬毒物の高感度一斉分析をサポート

Smart Forensic Database™には、乱用薬物、向精神薬、医薬品、農薬など中毒事例の多い薬毒物のMRM測定に必要な情報が登録されています。

Ver.2では、薬毒物285成分を増強し、約480成分の高感度一斉モニタリングが可能になりました。すべての登録成分に保持指標、MRMトランジション、コリジョンエネルギー、確認イオン比が登録されているため、煩雑な分析条件の最適化を行う必要がありません。また、保持時間修正機能（AART）で修正した保持時間を用いてメソッド作成ができますので、標準試料を分析して保持時間を確認する作業が必要がありません。

最適なMRMメソッドを自動作成

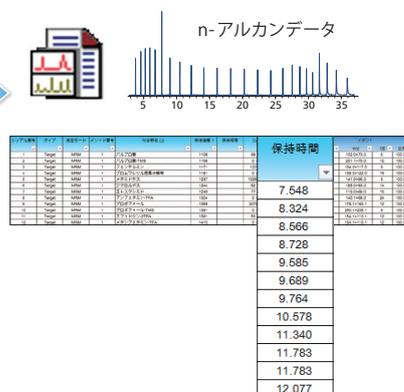
“Smart MRM”プログラムによって、MRMメソッドを自動作成します。多成分一斉分析では、測定プログラムの設定が困難ですが、“Smart MRM”では最適なプログラムを設定し、高感度メソッドを作成します。MRMメソッドは、ターゲット化合物の保持時間情報を基に作成しますが、AART機能を用いることで、n-アルカンを1回分析するだけで保持時間を修正し、メソッド作成に進めます。

Smart Forensic Databaseを用いたMRMメソッド作成手順

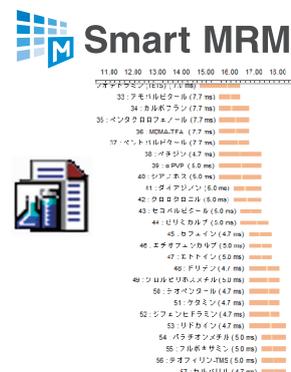
1. n-アルカンの分析



2. AARTによる保持時間の修正

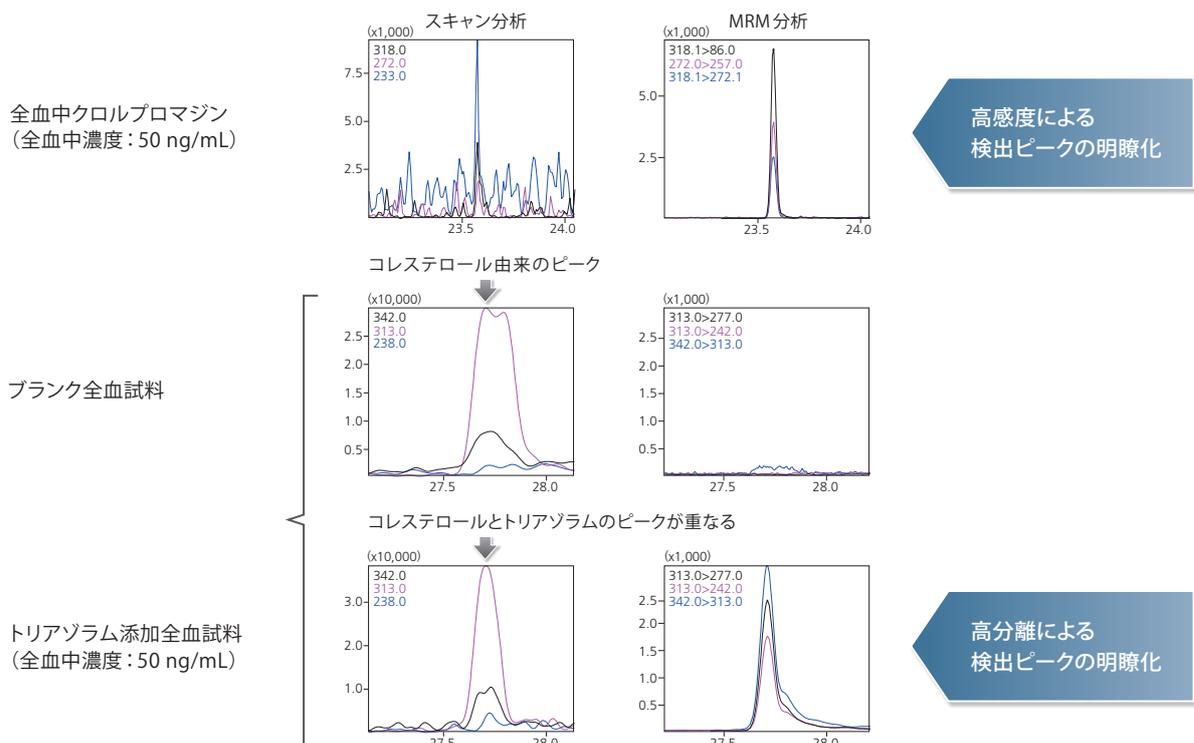


3. Smart MRM™を使用してMRMメソッドを自動作成



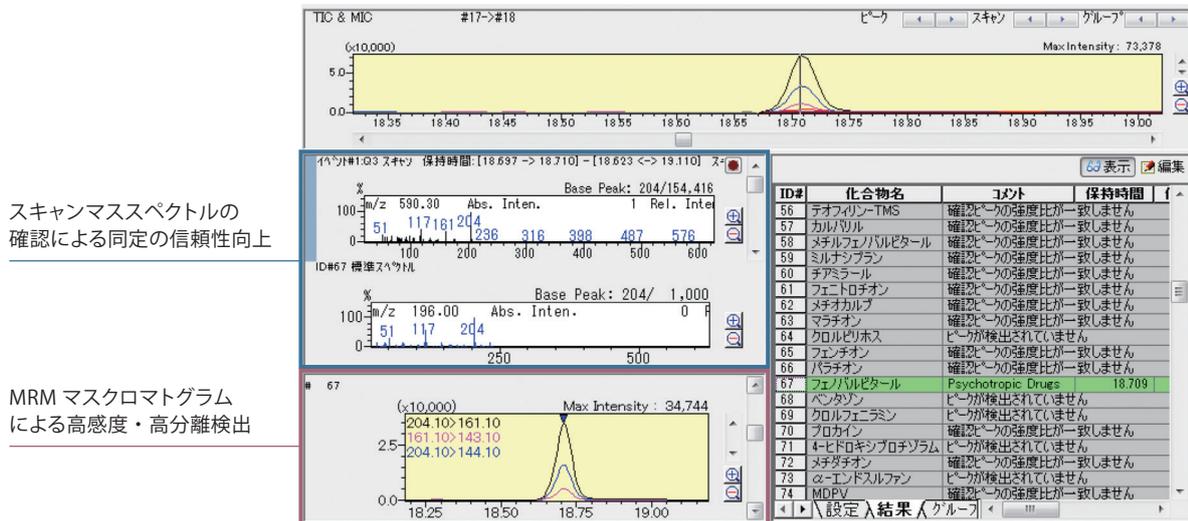
MRMによる高い質量分離と高感度検出

GC-MS/MSのMRMでは、2段階の質量分離を行うため、法薬毒物と生体試料中の夾雑物を分離して、高感度で検出することができます。生体中の法薬毒物の含有の有無を簡単に判断することができ、データ解析にかかる時間を大幅に減らすことが可能です。



スキャン/MRM同時測定データでの「GC/MS法薬毒物データベース」との連携

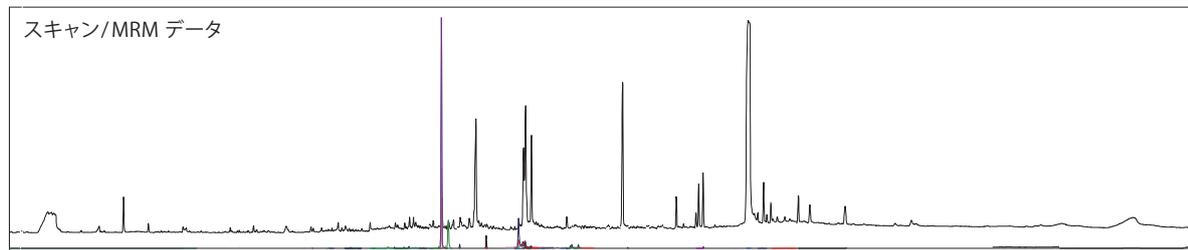
スキャン/MRM同時測定で得られたスキャンデータは、法薬毒物スクリーニング用データベース「GC/MS法薬毒物データベース」を用いて解析することが可能です。MRMデータは、「Smart Forensic Database」に登録されている中毒事例の多い法薬毒物の微量分析に利用し、スキャンデータは、乱用薬物の登録が充実している「GC/MS法薬毒物データベース」を用いることにより、危険ドラッグのスクリーニングに利用することが可能です。



スクリーンショットの左側にある注釈: スキャンマススペクトルの確認による同定の信頼性向上

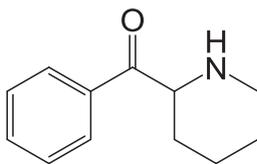
スクリーンショットの下部にある注釈: MRM マスクロマトグラムによる高感度・高分離検出

↑ MRMデータ + 「Smart Forensic Database」

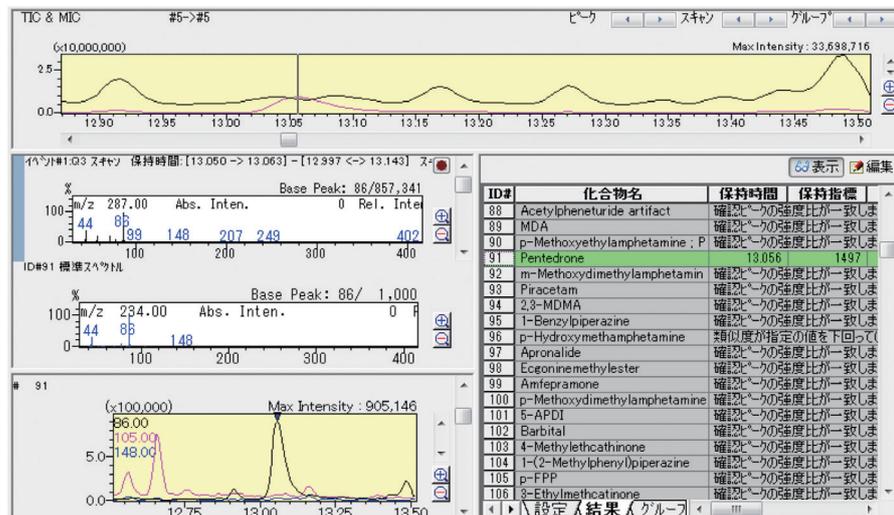


↓ スキャンデータ + 「GC/MS法薬毒物データベース」

危険ドラッグの1種であるペンタドロンの検出



Pentadone



仕様

登録化合物

| 化合物分類 | 登録成分数 |
|-------------|-------|
| 乱用薬物 | 51 |
| 精神神経病用薬 | 200 |
| 一般医薬品 | 87 |
| 農薬 | 125 |
| その他 | 5 |
| 内部標準 (ISTD) | 18 |
| 合計 | 486 |

| 誘導体分類 | 登録成分数 |
|------------|-------|
| 未変化体 (フリー) | 418 |
| TMS誘導体 | 59 |
| TFA誘導体 | 9 |
| 合計 | 486 |

製品構成

データベースファイル、メソッドファイル

対応装置

GC-MS: GCMS-TQ™シリーズ

ワークステーション: GCMSsolution™

LabSolutions™ DB GCMS、LabSolutions CS

Excel®: Microsoft® Excel® 2021、2019 (32bit版、64bit版)

Microsoft® Excel® 2016 (32bit版)

推奨消耗品

n-アルカン: C8-C40アルカンキャリブレーションスタンダード (Sigma-Aldrich、Cat: 40147-U)

分析カラム: SH-I-5Sil MS (30 m, 0.25 mm i.d., df=0.25 µm, P/N 221-75954-30)

または、DB-5ms (30 m, 0.25 mm i.d., df=0.25 µm)

注意事項

- データベースに含まれる情報の正確性や、その使用の結果得られる情報の有用性については何らの保証もされないことをあらかじめご了承ください。
- 本システムで得られる定性及び定量情報は、確認のために必ず標準試料を用いた試験を実施してください。
- 本データベースを用いて登録物質を確実に同定するためには、製品に含まれるメソッドファイルの装置条件にて測定してください。
- GC/MS 法薬毒物データベースはGCMSsolutionでのみ使用できます。

Smart Forensic Database、Smart MRM、GCMS-TQ、GCMSsolution、およびLabSolutionsは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。Excel およびMicrosoftは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標です。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。

なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証を受けておりません。

治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。

トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。

外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

株式会社 島津製作所

分析計測事業部 604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

東京支社 101-8448 東京都千代田区神田錦町1丁目3
(03)3219-(官公庁担当) 5631・(大学担当) 5616・(会社担当) 5622

関西支社 530-0012 大阪市北区芝田1丁目1-4 阪急ターミナルビル14階
(06)6373-(官公庁・大学担当) 6541・(会社担当) 6556

札幌支店 060-0807 札幌市北区北七条西2丁目8-1 札幌北ビル9階 (011)700-6605

東北支店 980-0021 仙台市青葉区中央2丁目9-27 プライムスクエア広瀬通12階 (022)221-6231

郡山営業所 963-8877 郡山市堂前町6-7 郡山フコク生命ビル2階 (024)939-3790

つくば支店 305-0031 つくば市吾妻3丁目17-1
(029)851-(官公庁・大学担当) 8511・(会社担当) 8515

北関東支店 330-0843 さいたま市大宮区吉敷町1-41 明治安田生命大宮吉敷ビル8階
(048)646-(官公庁・大学担当) 0095・(会社担当) 0081

横浜支店 220-0004 横浜市西区北幸2丁目8-29 東武横浜第3ビル7階
(045)311-(官公庁・大学担当) 4106・(会社担当) 4615

静岡支店 422-8062 静岡市駿河区稲川1丁目1-1 伊伝静岡駅前ビル2階 (054)285-0124

名古屋支店 450-0001 名古屋市中村区那古野1丁目47-1 名古屋国際センタービル19階

(052)565-(官公庁・大学担当) 7521・(会社担当) 7531

京都支店 604-8445 京都市中京区西ノ京徳大寺町1

(075)823-(官公庁・大学担当) 1604・(会社担当) 1603

神戸支店 650-0033 神戸市中央区江戸町93 栄光ビル9階 (078)331-9665

岡山営業所 700-0826 岡山市北区磨屋町3-10 岡山ニューシティビル6階 (086)221-2511

四国支店 760-0017 高松市番町1丁目6-1 高松NKビル9階 (087)823-6623

広島支店 732-0057 広島市東区二葉の里3丁目5-7 GRANODE広島5階 (082)236-9652

九州支店 812-0039 福岡市博多区冷泉町4-20 島津博多ビル4階

(092)283-(官公庁・大学担当) 3332・(会社担当) 3334

島津コールセンター (操作・分析に関する電話相談窓口)  0120-131691
IP電話等: (075)813-1691

<https://www.an.shimadzu.co.jp/>