

GC/MS Forensic Toxicological Database

The image is a composite advertisement for the Shimadzu GC-2030 gas chromatograph. In the foreground, the GC-2030 is shown, a black and silver instrument with a circular sample tray on top and a control panel on the right. In the background, a scientist wearing a lab coat, safety glasses, and a face mask holds a small vial. To the right, a computer screen displays the GC-2030's software interface, showing a chromatogram with several peaks and a table of peak data.

The chromatogram on the screen shows a baseline with several sharp peaks. The table below the chromatogram lists the following data:

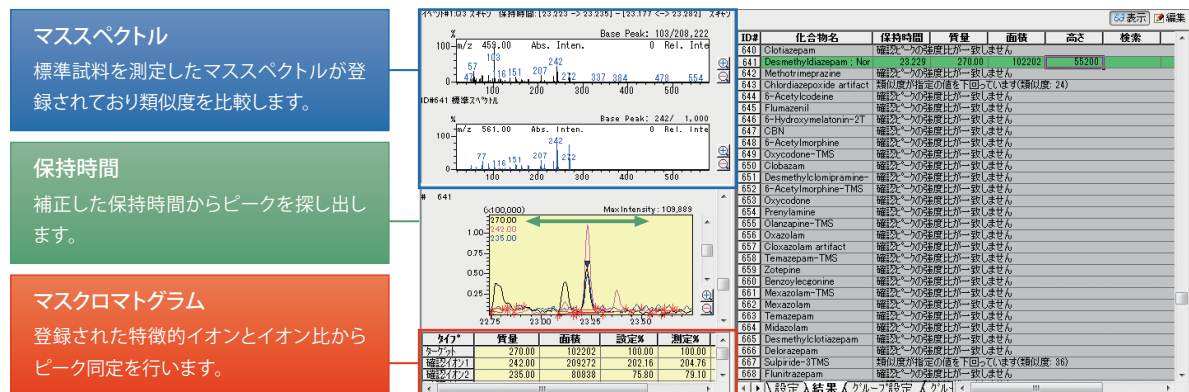
Peak	Name	Ret. Time	Peak Intensity	m/z	Ref. Comp.
1	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
2	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
3	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
4	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
5	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
6	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
7	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
8	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
9	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene
10	Chlorobenzene	11.892	1000	91	Chlorobenzene

GC/MSを用いた薬毒物分析のトータルサポートシステム

GC/MS法薬毒物データベースには、乱用薬物、精神神経病用薬、医薬品、農薬など中毒事例の多い薬毒物の一斉分析に必要な情報が登録されています。Ver.2では、登録薬毒物を1198種類増強し、2210種類が登録されています。また、ヘッドスペースを用いた血中アルコール分析とシアン化物やアジ化物などの揮発性毒物の最適な分析メソッドを提供することにより、GC/MSを用いた薬毒物分析についてトータルでサポートします。

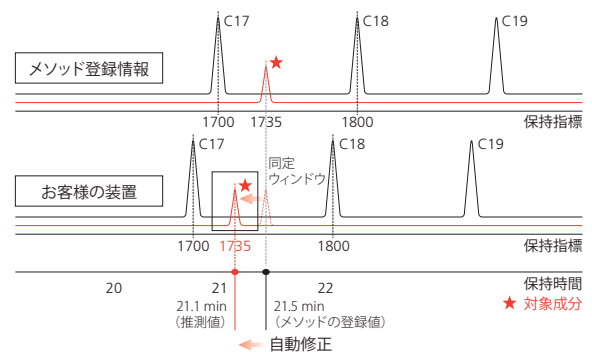
1. 高感度スキャン測定での1000成分以上の薬毒物一斉スクリーニングを実現

GC/MSのスキャン法は、薬毒物分析において従来から利用されており、中毒起因物質の同定に不可欠な手法です。マススペクトルライブラリを利用したデータ解析は、検出されたピークを検索し、薬物かどうかを判断します。生体試料由来のきょう雑物と重なったり、濃度が低いためTIC（トータルイオンカレントクロマトグラム）に埋もれたりした場合には、薬物を見逃す可能性があります。本データベースでは、質量分離されたマスクロマトグラムにより、薬物のピークを探し出し、登録されている保持時間、確認イオン比およびマススペクトルの類似度の3種類の情報により、薬物の含有の有無を判断するため、生体試料由来のきょう雑物の多いTICを確認する必要がなく、見逃しの少ないデータ解析と省力化を図れます。

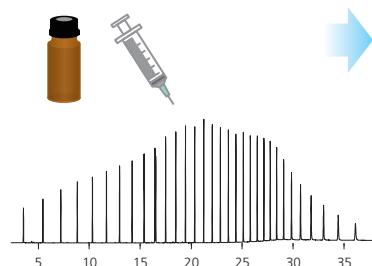


2. 登録化合物の保持時間を高精度に一括修正

メソッドファイルに登録されている化合物の保持時間は、保持時間修正機能（AART）を用いることでご利用のシステムに合わせた保持時間の一括修正ができます。低沸点から高沸点まで多点の時間補正リファレンス（n-アルカン）を用いるため、広範囲の保持時間領域で正確な保持時間修正が可能です。



1 n-アルカン分析



2 AARTで保持時間自動修正

ID#	化合物名	保持時間(修正前)	保持時間(修正後)	保持指標
1011	JWH-018 N-(5-h	30.354	30.439	3597
1012	Oxycodone	31.121	30.687	3621
1013	NNE1-MN-24	31.201	30.762	3628
1014	AM2282	31.213	30.773	3629
1015	MN-26	31.218	30.773	3629
1016	AM1220	31.340	30.890	3640
1017	AM1220 acepane i	31.443	30.985	3649
1018	APP-CHMINACA	31.719	31.243	3673
1019	JWH-100	31.800	31.318	3680
1020	Nicardipine	31.800	31.318	3680
1021	Pic-1	31.845	31.361	3684
1022	JWH-018 Biquino	31.880	31.392	3687
1023	FUJ-FB-22	32.135	31.628	3709
1024	Thiothixene	32.214	31.702	3716
1025	Thiopropazine	32.341	31.820	3727
1026	5-Fluor-NNE1	32.444	31.916	3736
1027	FUB-FB-22	32.629	32.087	3762
1028	BB-22-QUICHC	32.813	32.258	3768

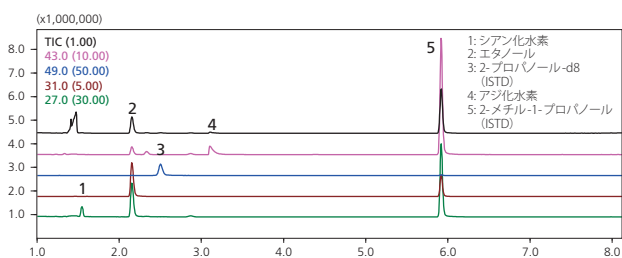
3 修正したメソッドで検体分析



3. ヘッドスペースHS-20 NXを用いた揮発性毒物分析をサポート

警察科学捜査研究所や大学法医学教室で不可欠な血中アルコール検査および揮発性毒物の最適な分析条件を提供します。揮発性毒物は、シアン化物、アジ化物およびシンナー成分（メタノール、酢酸エチル、トルエン）が登録されています。

また、半定量値が算出できるメソッドも準備しており、内部標準を試料に添加して測定するだけで、おおよその濃度値を確認することが可能です。定量するための検量線の濃度範囲を決める際に役立ちます。



HS-20 NXを用いた揮発性毒物と血中アルコールの一斉分析例



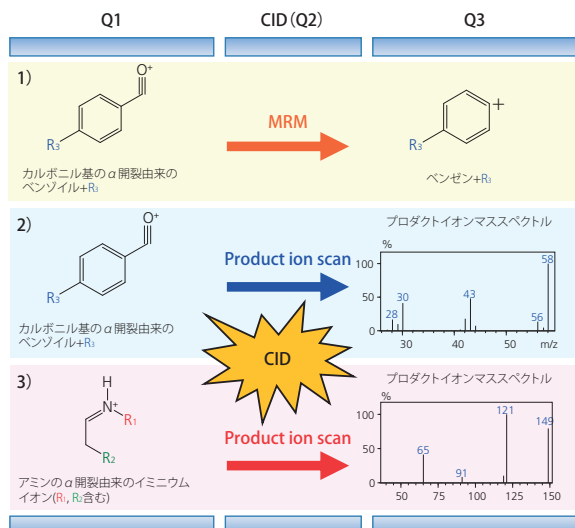
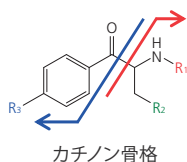
4. MS/MSモードを用いた包括指定薬物の一斉検出

GCMS-TQ™シリーズのMS/MSモードを利用することで、薬機法（医薬品、医療機器等の品質、有効性及び安全性の確保等に関する法律）で包括指定されているナフトイルインドール系合成カンナビノイド及びカチノン類の包括検出と構造推定を行います。

■ カチノン類の一斉検出

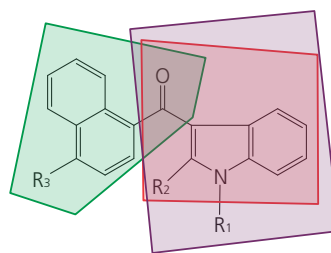
カチノン類に特徴的なベンゾイルとアミンのα開裂したイオンをGC-MS/MSのプロダクトイオンスキャンとMRMを用いて、包括指定に指定されている官能基を包括的に検出します。得られた各部分構造から構造推定を行えます。アミンに修飾する官能基は、多くの異性体を持ちEI-スキャン法では識別が困難ですが、プロダクトイオンスキャンを用いることで簡単に識別ができます。

- 1) カチノン骨格の識別とR₃の官能基推定
- 2) R₃の官能基推定と位置異性体の識別
- 3) R₁とR₂の官能基推定と構造異性体の識別

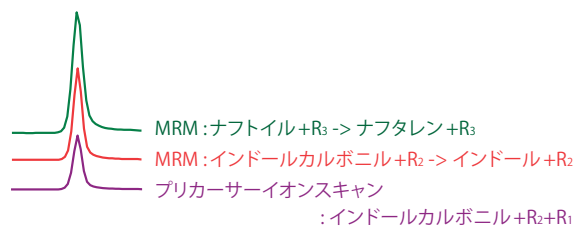


■ ナフトイルインドール系合成カンナビノイドの一斉検出

EIイオン化で開裂したナフトイルインドール系合成カンナビノイドに特徴的なナフトイルインドールとインドールカルボニルをGC-MS/MSのMRMとプリカーサーイオンスキャンを用いて、包括指定に指定されている修飾する官能基を包括的に検出します。また、得られた各部分構造から構造推定を行えます。



ナフトイルインドール系合成カンナビノイドの基本骨格



3種類のMS/MSモードのピークが同一保持時間に検出されることでナフトイルインドール系薬物の包括的な検出とR₁～₃官能基の構造推定が可能です。

データベース構成

登録化合物

化合物分類	登録成分数
乱用薬物	1504
精神神経病用薬	366
一般医薬品	189
農薬	128
その他	8
内部標準 (ISTD)	9
揮発性毒物 (HS)	6
合計	2210

半定量可能な化合物数: 234成分 (そのうちHS-20を用いた揮発性毒物は6成分)

誘導体化分類	登録成分数
未変化体	1333
TMS 誘導体	585
TFA 誘導体	292
合計	2210

- ※1 TMS体はトリメチルシリル誘導体、TFA体はトリフルオロアセチル誘導体を表します。
※2 半定量結果は、装置の状態により真値から大きくずれる場合があります。正確な定量結果を必要とする場合には必ず標準試料を用いた定量試験を実施してください。
※3 半定量を行う際には、試料溶液と内部標準物質を同時注入するソルベントフラッシュモードを使用します。

製品構成

データベースファイル (Excel™)、メソッドファイル、ライブラリファイル、レポートフォーマットファイル

対応装置

GC/MS:	GCMS-QP™シリーズ、 GCMS-TQシリーズ	Excel:	Microsoft® Excel 2024 / 2021 / 2019 (32 bit 版 / 64 bit 版)
オートサンプラ:	AOC-30i + AOC-20s	ワークステーション:	GCMSsolution™ Ver. 4.54 以降
ヘッドスペースサンプラ:	HS-20 NX (揮発性毒物メソッドを利用する場合)		LabSolutions™ GCMS™ の場合 Ver.5.131 以降 LabSolutions DB GCMS の場合 Ver.6.131 以降 LabSolutions CS の場合 Ver.6.131 以降

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:	薬毒物分析用 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)
	揮発性毒物分析用 SH-BAC2 (30m, 0.32mm i.d., df=1.2 µm, P/N 227-36262-01)
内部標準物質: 薬毒物分析用	Custom Internal Standard (Restek Corporation、Cat#: 560294)
	揮発性毒物分析用 2-プロパノール-d8 (99.5%) 2-メチル-1-プロパノール (99.5%)

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。
- 本データベースは研究用です。臨床診断用途で使用することはできません。

GCMS-TQ、GCMS-QP、GCMSsolution、LabSolutionsおよびGCMSは、株式会社島津製作所の商標です。
MicrosoftおよびExcel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・認証等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 (官公庁担当) (03) 3219-5631 (大学担当) (03) 3219-5616 (会社担当) (03) 3219-5622	つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511 (会社担当) (029) 851-8515	名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521 (会社担当) (052) 565-7531	広島支店 (082) 236-9652
関西支社 (06) 4797-7230	北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095 (会社担当) (048) 646-0081	京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604 (会社担当) (075) 823-1603	九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332 (会社担当) (092) 283-3334
札幌支店 (011) 700-6605	横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106 (会社担当) (045) 311-4615	神戸支店 (078) 331-9665	
東北支店 (022) 221-6231	静岡支店 (054) 285-0124	岡山営業所 (086) 221-2511	
郡山営業所 (024) 939-3790		四国支店 (087) 823-6623	

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