

Identification Grading System™ (IGS™)

ChromaTOF® ブランドソフトウェアの機能

精密質量のパワーは困難な化合物同定に確信をもたらします

LECOの新機能¹ *Identification Grading System (IGS)* はサンプルに含まれる化合物を素早くかつ自信をもって同定し、レポートで見るよう、データの確認を容易にします。これによってユーザーは次に何をすべきか自信を持って決定できます。

サンプルに何が含まれているかの推測はやめましょう：

IGSは、Pegasus® GC-HRT⁺ 4Dによって得られるすべての化学的情報を用い、未知化合物の同定プロセスに信頼性を追加します。

IGSは4つの基準で同定の格付けをします：

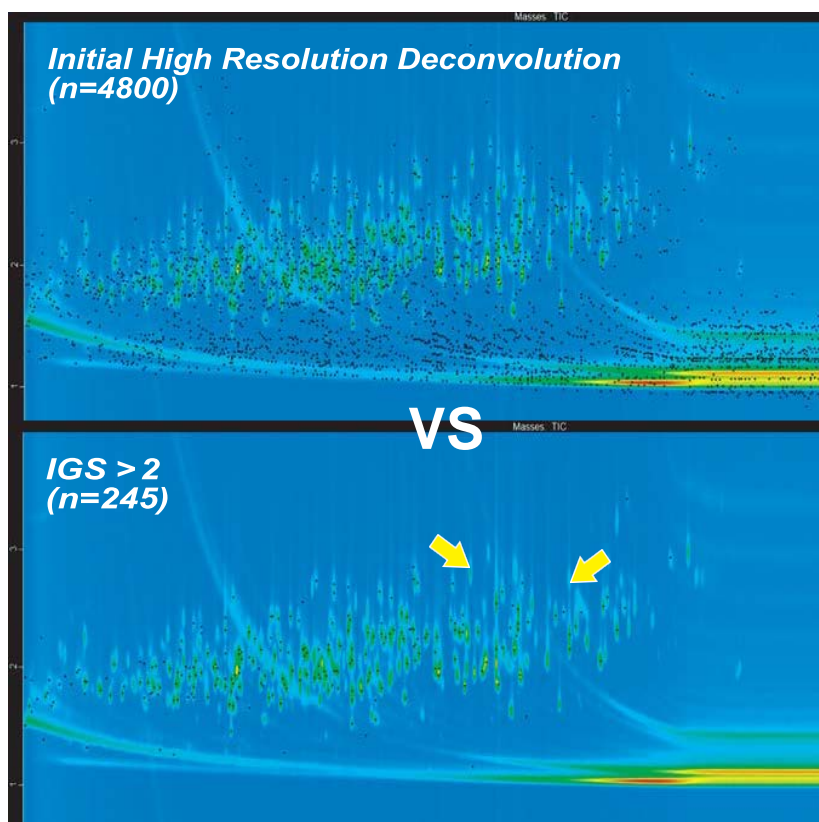
1. 分子イオンの存在とその精密質量
2. ライブラリに含まれるスペクトルとの良好な類似性
3. ライブラリヒット化合物から考えられるフラグメントイオンの元素組成と精密質量の一致
4. ライブラリヒット化合物とのリテンションインデックスの一致

IGSスコアが高いほど、同定の信頼性は高まります。

真の同定はGCxGCと高分解能飛行時間型質量分析計 (TOFMS) を組み合わせた場合にのみ、実現できるでしょう。

- GCxGC によって共溶出する化合物を分離できるため、一般的なガスクロマトグラフィと比べてクリーンなスペクトルが得られます。
- TOFMS は非常にシャープな2次元のピークであっても十分な数のスペクトルを取得し、これにデコンボリューションを組み合わせることで、最高品質のスペクトルが得られます。

IGSはEPAとのノンターゲット分析共同試験 (ENTACT) (<https://doi.org/10.1007/s00216-018-1435-6>)から生まれた、時間のかかるデータ確認プロセスに対するLECOのソリューションです。



EPAのENTACTプロジェクトのサンプルをGCxGC-TOFMSで分析、デコンボリューションしたクロマトグラム の例です。黒いポイントがデコンボリューションで自動検出された成分ですが、上の図ではIGSを使用していません。

下図ではIGSでフィルターし、高い信頼性で同定された成分だけが黒いポイントで表示されます。これによってデータは顕著に簡略化され、矢印で示したような「未知の未知成分」について直ちに検討することが可能となります。このサンプルはブラインドサンプルとして提供されましたが、含まれる既知成分の80%をIGSによって容易に同定することが可能でした。

GCxGCと高分解能TOFMSの組み合わせが、この信頼性にとって必要であることが証明されました。

IGSのセットアップとその使用法

IGS™ Scoring Configuration

Enable Similarity Check
 Minimum Similarity for Pass Rating (0 - 999):
 Minimum Valid Similarity (0 - 999):

Enable Fragment Ion Check
 Minimum Abundance (100 - 998):
 Required Mass Accuracy: +/- Mass Window mDa ppm

Enable Molecular Ion Check
 Minimum Library Abundance (0 - 998):
 Required Mass Accuracy: +/- Mass Window mDa ppm

Enable Retention Index Check
 Retention Index Window:

ライブラリとの類似性チェック

フラグメントイオンのチェック

分子イオンのチェック

リテンションインデックスのチェック

4つの基準をすべてクリアするとIGSスコアは4となります。

Hit Table - 2D Serum Two 1uL s10

Hit	Name	Library	IGS Score	IGS Concerns	Similarity	CAS
>1*	Secbumeton	replib	4.0		804	26259-45-C
2	Secbumeton	mainlib	4.0		795	26259-45-C
3	Secbumeton	Wiley Pesticides v2	3.0	RI:0	829	26259-45-C
4	Sebuthylazine-A (-Cl, +	Wiley DesignerDrugs 2	3.0	RI:0	802	26259-45-C
5	1,3,5-Triazine-2,4-dian	mainlib	2.0	SS:0 ; RI:0	669	13532-26-E
6	Terbumeton	Wiley Pesticides v2	2.0	SS:0 ; RI:0	579	33693-04-E
7	DOF 2PROP	Wiley DesignerDrugs 2	1.0	SS:0 ; RI:0 ; M+:0	566	
8	Terbumeton	replib	0.5	SS:0 ; RI:-	590	33693-04-E
9	Terbumeton	replib	0.5	SS:0 ; RI:-	552	33693-04-E
10	1,3,5-Triazine-2,4-dian	mainlib	-0.5	SS:0 ; RI:0 ; M+:-	629	55702-51-F
11	Atraton	Wiley Pesticides v2	-0.5	SS:0 ; RI:0 ; M+:-	622	1610-17-9
12	1,3,5-Triazin-2(1H)-one	mainlib	-0.5	SS:0 ; RI:0 ; M+:-	616	7374-53-0

LECOのChromaTOFソフトウェアでは、ヒットテーブルはデコンボリューションで検出された個々のピークとリンクしています。上図はあるピークのヒットテーブルですが、同定候補はIGSスコアの高い順に並んでいます。一位にランクされた化合物が同定結果サマリーに採用されます。このテーブルではカスタムライブラリを含む複数のライブラリを使用することが可能で、結果の確認や比較が容易にできます。