



TSDによるGC-MS自動ピーク同定

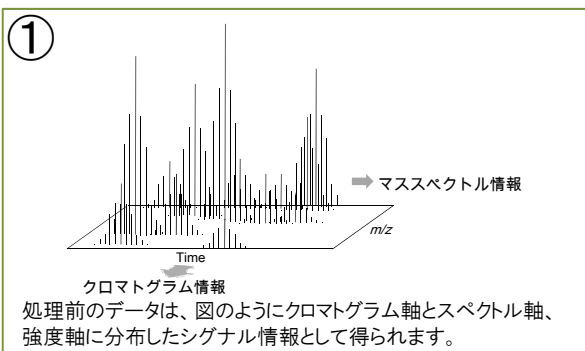
LECOのTSD (True Signal Deconvolution)アルゴリズム

TSD (True Signal Deconvolution)

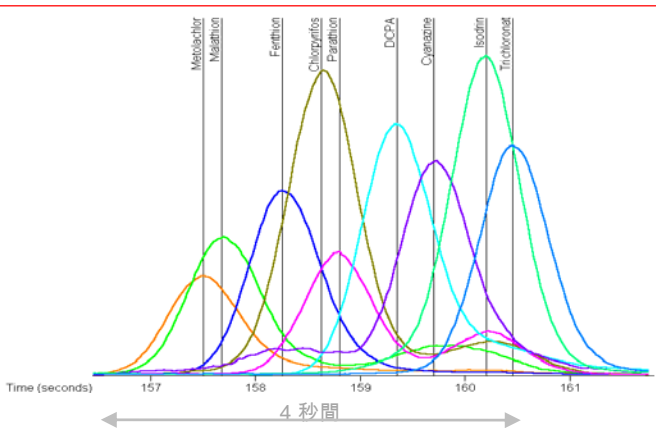
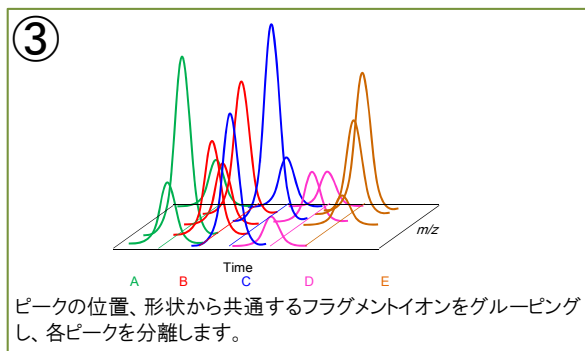
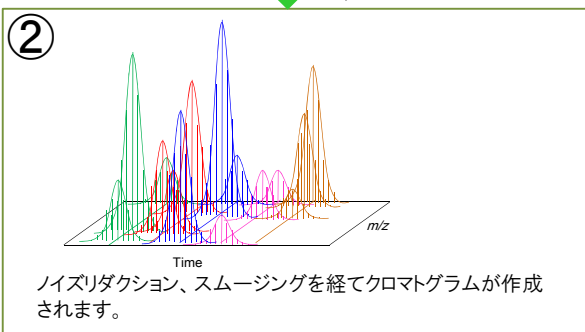
電子イオン化法によって得られたGC-MSデータは、多数のフラグメントイオンを大量に含む非常に複雑なスペクトルの集まりです。高速GC-TOFMSの登場により、これらの全ての情報が正確に記録することが可能となりましたが、このような膨大かつ複雑なデータでは差スペクトルなどのようなマニュアル解析レベルでは対応が困難です。GC-MSデコンボリューションのパイオニアであるLECOのTSDは、どんなに複雑に重なり合ったピークデータでも高い信頼性でピーク分離、スペクトル情報の抽出が可能なアルゴリズムとして全世界の多数の研究者に長年にわたり使用されてきました。

TSD の機能

TSDは、ガスクロマトグラフィーにより共溶出した成分を分離するために欠かせないツールとなっています。GC-TOFMSにより全領域のマススペクトルが超高速データ取得(Max500Hz)により、もらすところなく記録されると、各フラグメントイオンのシグナルからピークがトレースされます。この際、自動でノイズ除去、スムージングが行われます。超高速データ取得により、僅か0.1秒の時間差においても十分なデータポイントが与えられるため、そのわずかなピーク形状の違いから、他のピークを除く事が可能となり、個々のピーク及びマススペクトルを得ることができます。



↓ TSD処理



まとめ

TSDは、複雑にピークが重なり合った領域からでも、経験など必要とせず自動的に個々のピーク、マススペクトルを抽出する事が可能です。この機能では、TOFMSの超高速データ取得によってピーク分離に十分なデータポイントが得られる事でピーク認識の正確さが向上します。また、TSDによる自動解析はライブラリーサーチの正確性も著しく向上させ、同時に煩わしい手動によるデータ解析からも解放されるため実験の作業性も格段に向上されます。LECOのGC-TOFMSデータは、整数質量表記による極限までのデータ軽量化のため、TSDのような複雑なアルゴリズムを用いても短時間(GC-TOFMSデータで数分間)に処理が可能です。

LECOジャパン合同会社

〒105-0014 東京都港区芝2-13-4
住友不動産芝ビル4号館
TEL:03-6891-5800 FAX:03-6891-5801