

## SRM測定メソッド作成を支援するSRM化合物データファイルの紹介

関連製品：質量分析計(MS)

### 概要

食品中残留農薬の一斉分析を行う場合、化合物ごとに設定すべき項目が多く、新規に測定条件を作成する場合は多くの時間を要する。JMS-TQ4000GCでは、最適な条件でSRM (Selected Reaction Monitoring) 測定を行うための、最適なトランジションやコリジョンエネルギー(CE)を化合物ごとにまとめた「SRM化合物データファイル」を標準搭載しており、このデータファイルから測定対象成分を選択してSRM測定メソッドおよび定量解析条件を容易に作成することが可能である。現在は食品中残留農薬分析において、GC/MSによる測定が対象となる農薬成分、約400種類以上がプリインストール済みである。また、SRM化合物データファイルに未登録の化合物を新規に測定したい場合の支援機能として、対象化合物の最適なトランジションおよびCEを自動検出するための「SRM最適化ツール」を標準搭載し、データファイルに登録されていない新規化合物のSRM測定メソッド作成を強力に支援している。本稿では、「SRM化合物データファイル」および「SRM最適化ツール」を紹介する。

### SRM化合物データファイル

Fig.1に示したSRM化合物データファイルに、約400成分の農薬に関する保持時間、トランジション(プリカーサー、プロダクトの2つの選択イオンの質量数)、コリジョンエネルギー(CE)の情報が登録されている。

(保持時間は、厚生労働省の通知法「GC/MSによる農薬等の一斉試験法(農産物)」記載のGC条件に基づき、農薬名は厚生労働省の化合物表記に準拠している。)

このデータファイルから測定したい化合物名を選択してSRM測定メソッドおよび定量解析条件を容易に作成することが可能である。

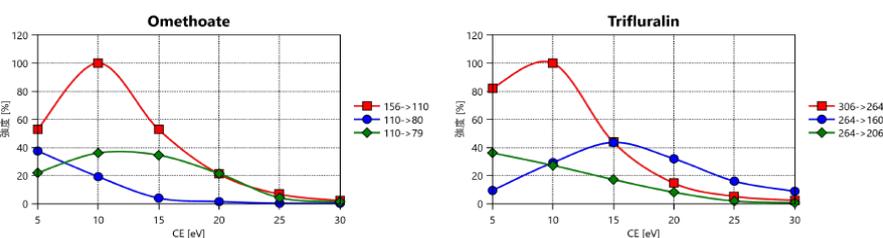
なお、データファイルに登録される成分は、市販の富士フィルム和光純薬株式会社製農薬混合標準液 PL-1~13(PL-7,8を除く)に対応しており今後随時拡充を予定している。

化合物名	R.T.[min]	種別	プリカーサー m/z	プロダクト m/z	CE[eV]	I/Q
Acetochlor	17.21	定量	146	131	15	1
		参照1	223	132	25	0.61
		参照2	146	130	25	0.89
Acrinathrin	23.47	定量	208	181	10	1
		参照1	181	152	20	0.92
		参照2	208	180	10	0.17
Aldrin	18.35	定量	263	193	25	1
		参照1	263	228	25	0.93
		参照2	293	222	25	0.5
Allethrin 1	18.93	定量	123	81	5	1
		参照1	123	95	10	0.51
		参照2	136	108	10	0.45

Fig. 1 SRM化合物データファイル

### SRM最適化ツール

「SRM化合物データファイル」に登録されていない新規化合物を定量測定したい場合に有効な機能が、「SRM最適化ツール」である。対象化合物のシングルスキャン測定結果(保持時間およびプリカーサーイオン候補)を用いて、プロダクトイオンスキャンのメソッドを自動作成し、この測定結果から対象化合物のSRM測定時に最適な各種トランジションおよびCEを自動検出することが可能である。このツールを使用したSRM最適化結果の一例をFig. 2に示す。化合物ごとにCEと各トランジションのイオン強度をプロットしたグラフが表示され、登録可能なトランジション数は最大5個まで選択できる。最適なトランジションとCEの組み合わせ結果が、各トランジションのイオン強度の順にリストアップされ、必要に応じて編集することも可能である。また、登録対象の化合物を任意に選択し、「SRM化合物データファイルへ登録」で「SRM化合物データファイル」の新規作成および既存のデータファイルへの追加登録が容易に可能である。



選択	化合物名	R.T. [min]	種別	プリカーサー-m/z	プロダクトm/z	CE [eV]	I/Q
<input checked="" type="checkbox"/>	Omethoate	9.93	定量	156	110	10	1
<input type="checkbox"/>			参照1	110	80	5	0.37
<input type="checkbox"/>			参照2	110	79	10	0.36
<input checked="" type="checkbox"/>	Trifluralin	10.63	定量	306	264	10	1
<input type="checkbox"/>			参照1	264	160	15	0.43
<input type="checkbox"/>			参照2	264	206	5	0.36

最適化結果の編集も可能

登録ボタン

SRM化合物データファイルへ登録

Fig. 2 SRM最適化ツール

Copyright © 2020 JEOL Ltd.

このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出入管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせ下さい。

