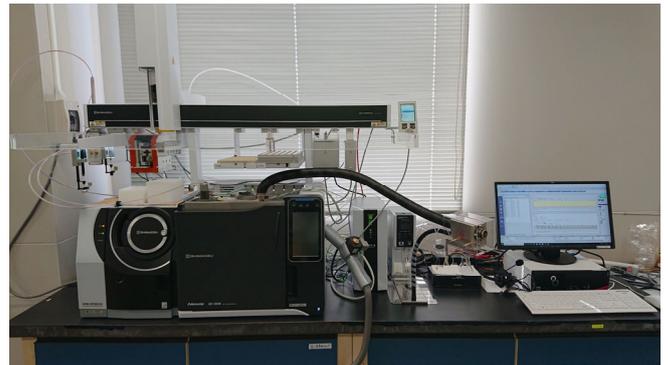


GC-MSデータ解析用プログラムの作成

研究の背景

ガスクロマトグラフ(GC)では、質量分析器(MS)と水素炎イオン化検出器(FID)の結果を組み合わせ、検出成分の定性・定量の解析を行うことができます。しかし、機器毎にデータフォーマットが異なり互換性がないため、煩雑な解析を手作業で行わざるを得ませんでした。



オートサンプラー付 GC-MS/O

プログラムの作成

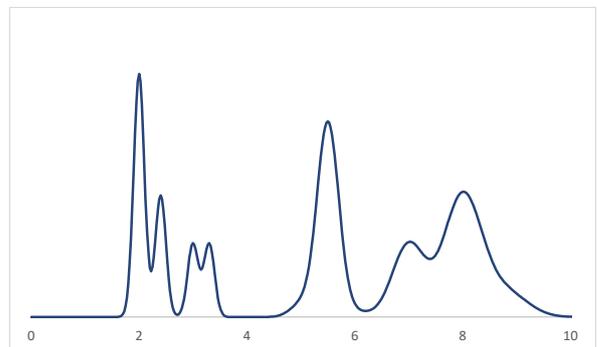
そこで、専門知識がなくとも容易に解析できるプログラムを目標に、①データの可搬性、②精度向上、③解析作業自動化、④GC-MS/O と HS-GC の組合せ解析、に取り組むことにしました。

プログラムの作成には ChatGPT を援用し、Python で行いました。

結果

GC-MS の m/z 毎の保持時間と強度の解析プログラムを作成しました。まず GC-MS 専用の mzXML 形式から汎用書式の CSV 形式に変換し、その後 Savitzky-Golay 法によるスムージング、高次微分法によるピーク検出及びそのリスト化を行いました。

分析時間に比べ処理時間が2倍以上になり、時間短縮にはアルゴリズムの見直しが必要ですが、データの可搬性は実現できました。

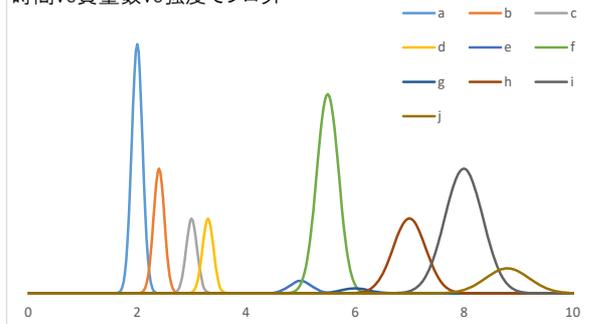


【装置ソフト】

- ・全 m/z の和(TIC)が表示
- ・個別の m/z を表示もできるが、別途任意に選択



時間vs質量数vs強度でプロット



【作成プログラム】

- ・個別の m/z が表示可能
- ・Excel 上で作成可能

作成プログラムと装置ソフトの比較(イメージ)