

MALDI-SpiralTOFMS を用いた イオン強度比評価のための測定条件および解析手法 ～Python を用いて効率化を目指す～

○西川 嘉子 ^{a)}

^{a)}奈良先端科学技術大学院大学 技術室 マテリアル研究プラットフォームセンター

1.はじめに

奈良先端科学技術大学院大学マテリアル研究プラットフォームセンター¹⁾では、文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM）事業²⁾に参画しており、所有する共通機器を学外へ提供している。登録装置は30台であり、そのうち筆者が担当する質量分析装置は、今回使用したJMS-S3000 SpiralTOF MSを含め6台である。筆者が受ける総依頼件数は年間1000件程度であり、そのうち学外利用は約4割を占める。

今回、外部依頼者が所持しているRapifleX MALDI TOF/TOF MS (Bruker Corp., Billerica, MA, USA)を用いて検出した分子質量関連イオンの強度比と筆者の所属機関のJMS-S3000 SpiralTOF MS (JEOL Ltd., Tokyo, Japan)の間でデータ比較をしたいという依頼があった。通常は取得したデータを依頼者へ返却し、その後の解析は依頼者が実施する。しかし、本件では分子質量関連イオンの強度比評価を行う必要があったため、装置特性を踏まえた測定条件の検討やデータ解析まで実施した。本発表では、JMS-S3000 SpiralTOF MSによる分子質量関連イオンの強度比評価に向けた測定条件の検討およびPythonを用いたデータ解析の効率化について紹介する。

2.質量分析装置及びデータ取得方法

質量スペクトルはJMS-S3000 SpiralTOFMS（レーザー波長349 nm）を用いて取得した。測定はスパイラルポジティブイオンモード（質量範囲：100-2000 Da）、Intensity Offsetは-1.5%、Laser Frequencyは250 Hzで行った。これらの条件の下で、各試料×マトリックスごとに5スポットを準備し、各スポットについて同一条件で測定を行った。測定に際しては、同一箇所への連続照射によるピーク強度変動の影響を低減するため、スポット内の異なる位置から約100ショット（1スペクトル）×5回取得し、各測定の平均値を算出した。

参考文献

- 1) 奈良先端科学技術大学院大学マテリアル研究プラットフォームセンター (<https://cmp.naist.jp/>)
- 2) 文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ (<https://nanonet.go.jp/>)