

多変量解析を活用した3種のサンプルの比較分析

内容

多成分を含むサンプル間の差異や類似度の分析、そのサンプルを特徴付ける化合物の特定には煩雑な解析を行わなければならない、多くの時間を要します。本テクニカルインフォメーションでは、3種のサンプルをLC/MSで測定し、取得したデータを多変量解析する事でサンプル間比較を実施しました。

分析試料

サンプル3種 (A : アミノ酸系, B, C : 高級アルコール系)、およびA, B, Cを等量ずつ混合したもの (以下MIXとする) (各n=5で測定)

分析条件

- System : Agilent 1260 Infinity II + LC/MSD (G6125B)
- HPLC method
- カラム : InfinityLab Poroshell 120 EC-C18 2.1×100 mm, 2.7 μm (P.N. 695775-902)
- 移動相A : 10 mM ギ酸アンモニウム水溶液
- 移動相B : アセトニトリル
- 流量 : 0.2 mL/min
- 注入量 : 1 μL
- MS method
- イオン源 : ESI
- マスレンジ : m/z 100-1000 (MS)
- 極性 : Positive

結果



図1 TIC (上からA, B, C, MIX)

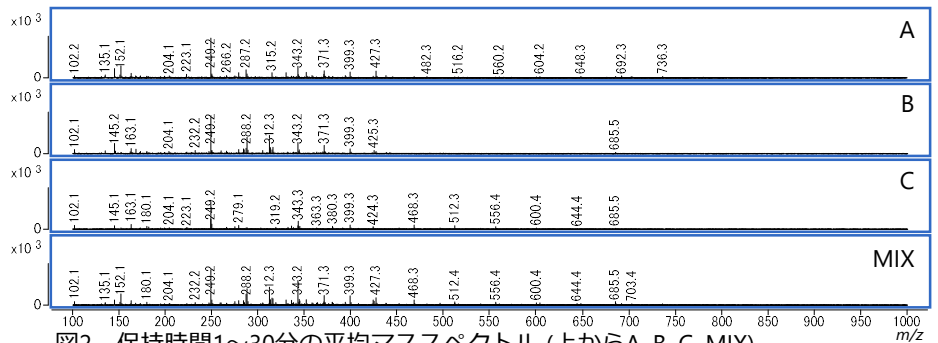


図2 保持時間1~30分の平均マススペクトル (上からA, B, C, MIX)

クロマトグラムやマススペクトルを解析してサンプル間の差や特徴的な化合物を見つけるのは煩雑で時間がかかる



Agilent Mass Profiler ソフトウェア (2群比較) および Mass Profiler Professional ソフトウェア (多群比較) を使用することで容易に試料間比較ができ、不良品判定、他社製品比較、グループ別分類、不純物分析などに適用できます。

MPPによる解析結果

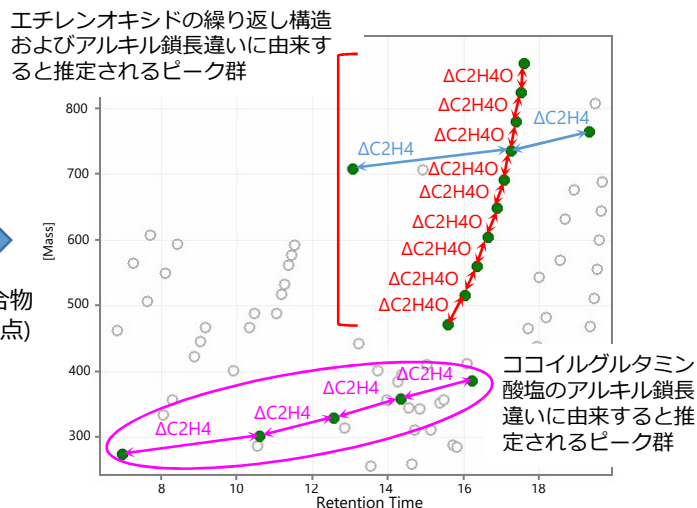
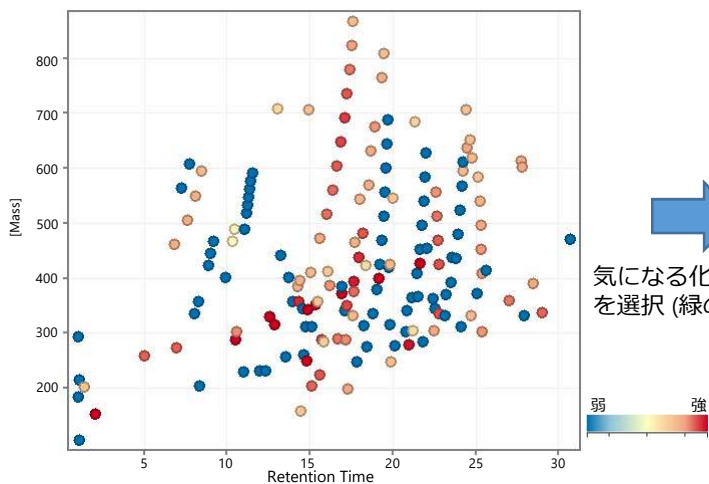


図3 サンプルAのMass vs RT プロット (左: フルスケール、右: 拡大)

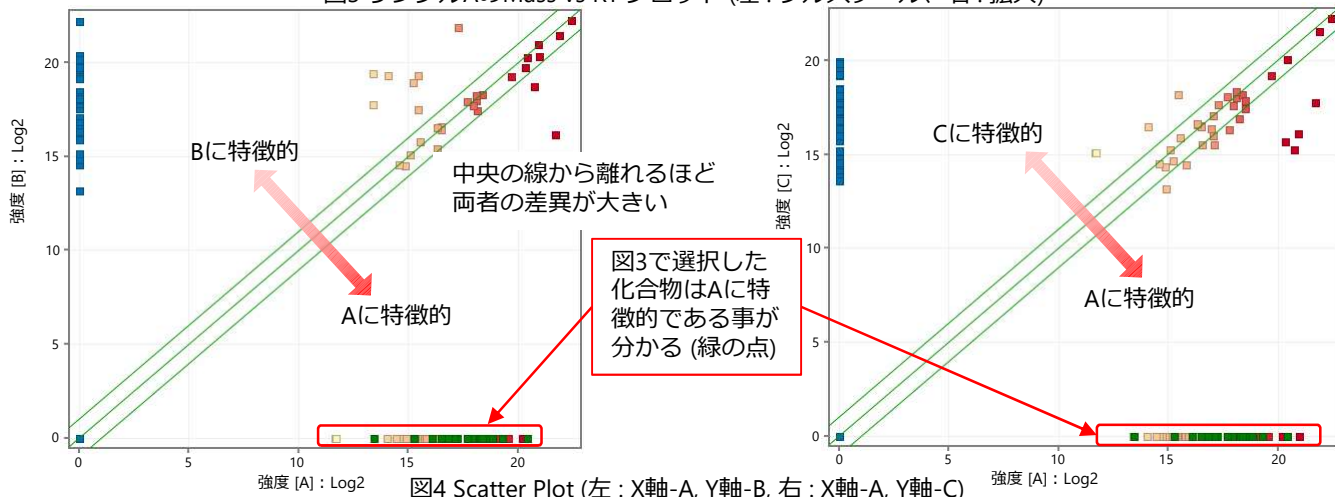


図4 Scatter Plot (左: X軸-A, Y軸-B, 右: X軸-A, Y軸-C)

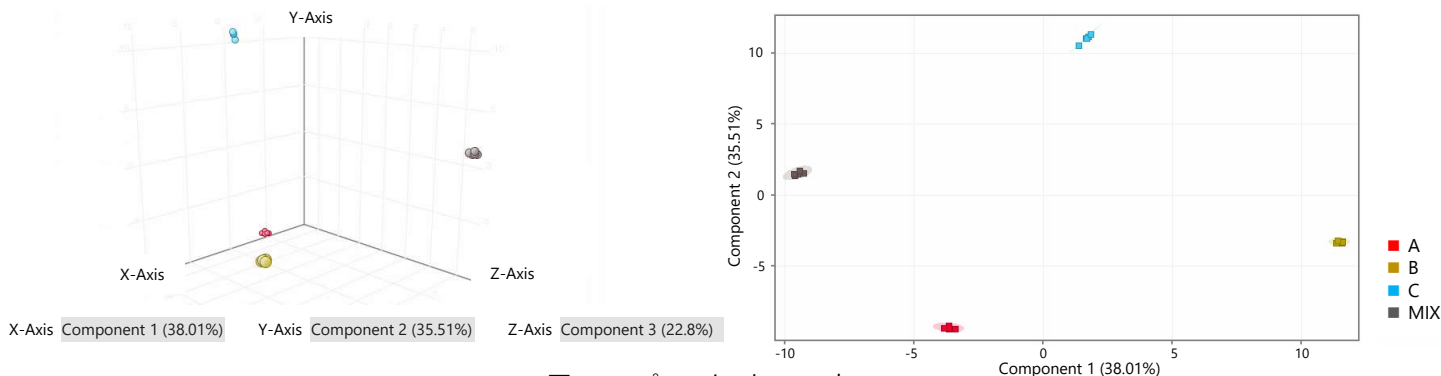


図5 PCAプロット (左: 3D, 右: 2D)

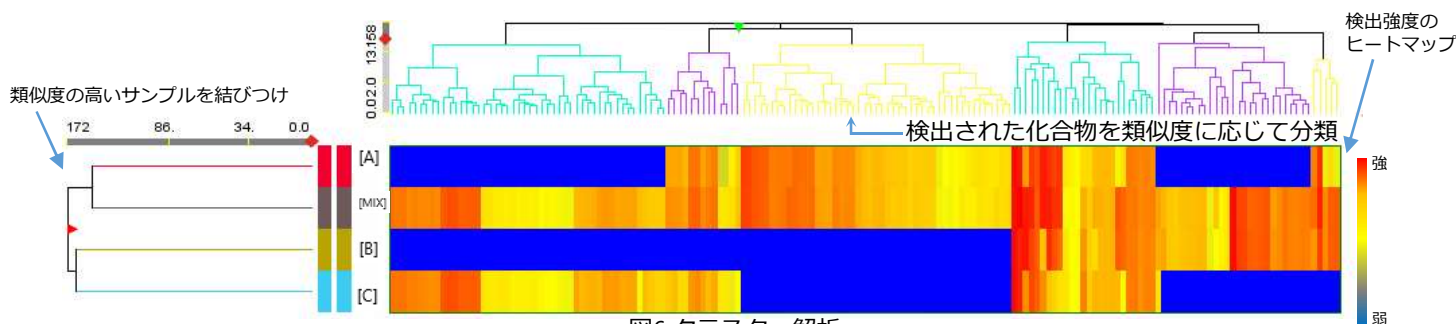


図6 クラスタ解析

クラスタ解析により、BとCの類似度が高い事が分かりました。Aのみアミノ酸系シャンプーである事から、含有成分の違いが反映された結果と考えられます。

MPPのScatter Plotで、クロマトグラムやマススペクトルの比較では難しかった特定のサンプルに特徴的な化合物の発見ができました。サンプルの情報があれば差のある化合物を推定することも可能です。MPPのクラスタ解析により、検出された化合物に応じたサンプルの類似度の評価ができました。その他、主成分分析 (PCA) 等も用いることで、ロット間比較、劣化解析、経時変化の解析、良品/不良品解析を効率化できます。