

論文賞

加藤裕志氏 (日本電子株式会社, 博士(工学))



[対象論文] **New Deconvolution Method for Electrospray Ionization Mass Spectrometry**

[*J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.*, **48**, 373-379 (2000)]

加藤裕志氏は広島大学大学院理学研究科を修了後、英国留学を経て1981年に日本電子株式会社に入社した。大学時代はマイクロ波分光法やレーザー分光法を用いた振動回転スペクトルの研究に携わった。日本電子株式会社に入社後は赤外分光光度計のコンピュータシステムの開発を担当し、主にスペクトル解析の研究に力を注いだ。1993年以降、質量分析計の開発に携わり、分光計のコントロールプログラムやアプリケーションプログラムの開発を行っている。質量分析に関するデータ処理としてダイオキシン類やポリ塩化ビフェニール(PCB)のガスクロマトグラフィーにおける保持時間の解析、エレクトロスプレーイオン化法(ESI)における多価イオンの解析、自己回帰モデルを用いたスペクトル分解能の向上アルゴリズムの開発などを行ってきた。さらに、飛行時間型質量分析計の収差解析およびスペクトルシミュレーションについての研究も行っている。これらのデータ処理アルゴリズムの開発により2001年、東京農工大学大学院生物システム応用科学研究所にて学位(工学)を授与された。

今回受賞に至った本論文ではESIデコンボリューションの新しいアルゴリズムを開発した。ESIデコンボリューションはMannらによって提唱され、 m/z 軸をもつESI多価イオンスペクトルを分子質量を軸にもつスペクトルに変換する方法である。しかし、Mannらのアルゴリズムは疑似ピークを多数発生するという欠点があった。その後、いくつかの新しいアルゴリズムが提唱されたが、完全に疑似ピークの発生を抑えることができなかった。あるいは、複雑で計算負荷の大きいアルゴリズムであった。本論文の方法では、疑似ピークがほとんど発生しないデコンボリューションスペクトルを得ることができる。同時にノイズの影響を軽減することができ、 S/N 比の良いスペクトルとなる。さらに、高速なアルゴリズムで計算時間が短いことや必要とするパラメータ数が少ないことなどの特長から使いやすいコンピュータプログラムである。今やESIは質量分析に不可欠なイオン化法であり、本論文のアルゴリズムを用いたコンピュータプログラムがマススペクトルの解析に大きく寄与すると期待される。

以上の理由から、本論文は2002年度日本質量分析学会論文賞に相応しいものと認められた。

関連論文リスト等

- 1) H. Kato, Y. Ueda, and M. Nakata, Calibration Method for the Gas-Chromatographic Retention Time of Polychlorinated Biphenyl Congeners. *Anal. Sci.*, **16**, 693-699 (2000).
- 2) 貫名義裕, 加藤裕志, 大気圧イオン化法を用いた直交加速型飛行時間質量分析計の収差とスペクトル分解能. *質量分析*, **48**, 395-400 (2000).
- 3) H. Kato, M. Ishihara, and M. Nakata, Resolution Enhancement in Mass Spectrometry by Auto-regressive Deconvolution. *J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.*, **49**, 175-182 (2001).