

Solutions for Innovation

JMS-T2000GC AccuTOF™ GC-Alpha

Pursuing performance and functionality



「Alpha アルファ」 — それは始まりのとき

めざしたのは新たな質量分析の世界を生み出すこと

性能と機能を追求した究極の GC-MS JMS-T2000GC “AccuTOF™ GC-Alpha” 始動



JMS-T2000GC AccuTOF™ GC-Alpha

2004

JMS-T100GC AccuTOF™ GC

- ・質量分解能 5,000
- ・質量精度 5 ppm
- ・スペクトル記録速度 25 Hz
- ・マスレンジ m/z 2,000



2008

JMS-T100GCV AccuTOF™ GCv

- ・EI/FI/FD 共用イオン源
- ・チューニングアシスタント機能
- ・分解能向上 (5,000 → 6,000)



2012

JMS-T100GCV AccuTOF™ GCv 4G

- ・分解能向上 (5,000 → 8,000)
- ・質量精度向上 (5 ppm → 3 ppm)
- ・スペクトル記録速度向上 (25 Hz → 50 Hz)
- ・マスレンジ向上 (m/z 2,000 → 5,000)



2015

JMS-T200GC AccuTOF™ GCx

- ・EI/PI 共用イオン源
- ・msAxel ソフトウェア
- ・分解能向上 (8,000 → 10,000)
- ・感度向上 (S/N 100 → 300)
- ・マスレンジ向上 (m/z 5,000 → 6,000)



2018

JMS-T200GC AccuTOF™ GCx-plus

- ・msFineAnalysis ソフトウェア
- ・自動リザーバー

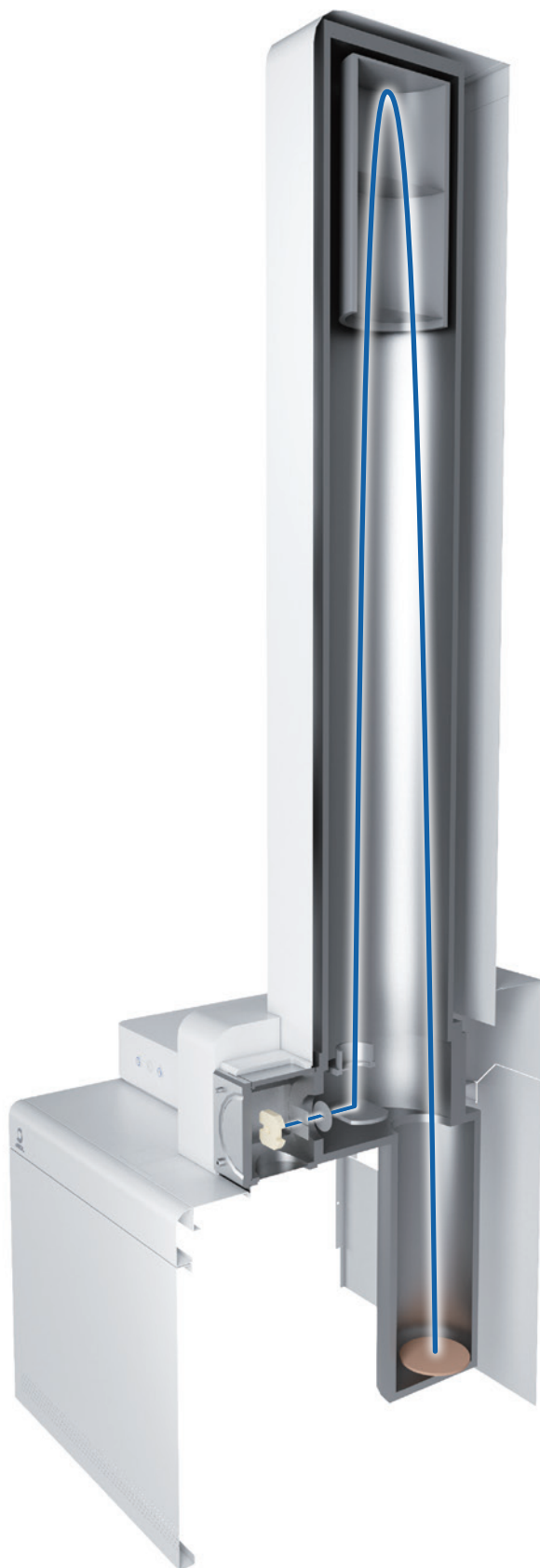


日本電子では、磁場セクター質量分析計に次ぐ第2の高分解能質量分析計として直交加速飛行時間質量分析計を開発し、2001年に大気圧イオン化飛行時間質量分析計 JMS-T100LC AccuTOF™ を上市しました。AccuTOF™ は2002年3月に開催されたPittsburg Conferenceにおいて世界市場へ導入され、当時市販されていたLC-TOFMSの最大の問題点であったダイナミックレンジの狭さを克服し、実用性の高いLC-MSとなったことが評価され、Pittcon Editors' Bronze Awardを受賞しました。

2004年には、AccuTOF™ の共通質量分析部にEI、CI、FI、FDの真空イオン源を搭載したガスクロマトグラフ飛行時間質量分析計 JMS-T100GC AccuTOF™ GC を上市しました。AccuTOF™ GC は、世界で初めて質量分解能 5,000 と 25 Hz のスペクトル記録速度を同時に両立させた、精密質量測定が可能なGC-MSとなりました。

AccuTOF™ シリーズの進化は JMS-T2000GC AccuTOF™ GC-Alpha へ脈々と受け継がれています。

高性能でありながら簡単・迅速をコンセプトに
「Alpha アルファ」が実現した 2 つの Key Technology



Key Technology 1

高性能を追求した新開発ハードウェア

AccuTOF™ GC-Alpha は初代 AccuTOF™ GC から数えて第 6 世代の GC-TOFMS です。イオン光学系は従来の V 字とは逆の形になりました。装置名の “Alpha” には装置を横から眺めた際のイオン軌道（逆 V 字 = A）を示す意味と、この装置と共に質量分析の新たな世界へスタートを切るという開発者の思いが込められています。

AccuTOF™ GC-Alpha は 2 ステージ電場勾配のリフレクトロンを搭載した直交加速飛行時間質量分析計（oa-TOFMS）です。高いイオン透過率（= 感度）と超高分解能を両立した理想的なイオン光学系を有しています。

■ 定性解析に重要な質量分解能／質量精度

$$R_{FWHM} = \frac{t}{2\Delta t}$$

R_{FWHM} ：分解能

t ：イオンの飛行時間

Δt ：イオンピーク幅

飛行時間質量分析計における分解能は上式より計算されます。

AccuTOF™ GC-Alpha では超高分解能を達成するために、以下に示すハードウェアを新規に開発しました。

- ▶ t をより大きく：飛行距離を 4 m にアップ
- ▶ Δt をより小さく：2 ステージ反射電場を用いた新規イオン光学系
- ▶ Δt をより小さく：広範囲なエネルギーをもつイオンに対応したイオン輸送系

新開発ハードウェアにより、第 1 世代の AccuTOF™ GC から比べて 6 倍の高分解能化を達成し、それに伴い質量精度も大きく改善しました。AccuTOF™ GC-Alpha の質量精度仕様値は 1 ppm です。

GC/MS 定性解析ソリューションの決定版として、他の追随を許さない高品質な測定データを提供致します。未知物の定性解析にも答えをだせる究極の GC-MS の登場です。

AccuTOF™ GC-Alpha の基本性能

定性分析にも、定量分析にも対応した高い基本性能を達成



同時に実現！ 4つの『高』スペックと2つの『広』スペック

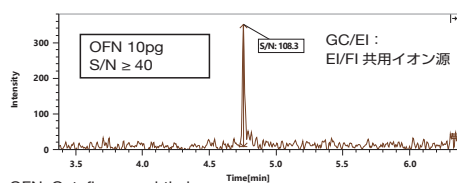
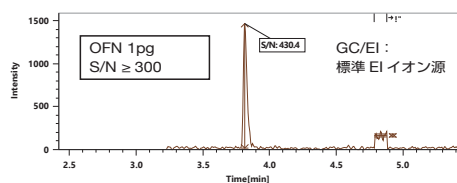
AccuTOF™ GC-Alpha は高質量分解能、高質量精度、高感度、高速データ取得、広ダイナミックレンジ、広質量範囲を同時に実現したハイエンド GC-MS システムです。

高質量分解能と高質量精度は今までにない高品質な定性分析結果を提供します。高速データ取得は GCxGC といった最新の GC/MS 測定への適用を実現し、広ダイナミックレンジは定量分析のみならず、混合試料の定性分析においても有効です。広質量範囲はダイレクト MS 測定で特に威力を発揮し、高感度は今まで見えていなかった微量成分の情報を引き出します。

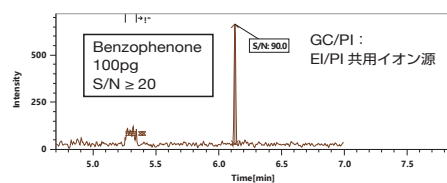
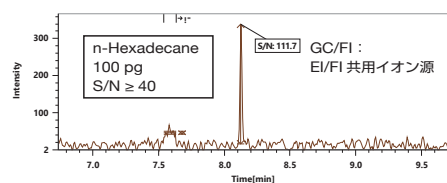
GC-MS として高い基本性能を有した AccuTOF™ GC-Alpha は、今まで諦めていた分析の限界を取り去ります。

高感度

標準 EI イオン源は超高感度を有しており、微量定量分析にも対応可能です。

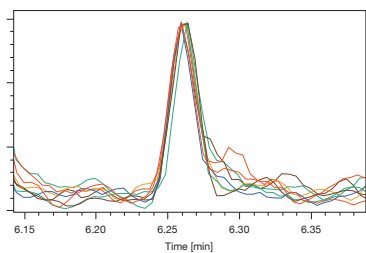


OFN: Octafluoronaphthalene



装置検出限界：IDL=18.7 fg

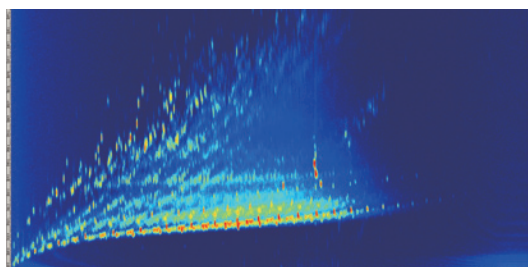
OFN 100 fg を標準 EI イオン源で連続 8 回測定し、観測された分子イオンの抽出イオンクロマトグラムの面積値とその再現性より装置検出下限を算出したところ、18.7 fg を達成しました。



| Injection No. | Peak Area |
|---------------|-----------|
| 1 | 1187 |
| 2 | 1239 |
| 3 | 1126 |
| 4 | 1210 |
| 5 | 1236 |
| 6 | 1088 |
| 7 | 1044 |
| 8 | 1123 |
| RSD(%) | 6.2 |
| IDL(fg) | 18.7 |

高速データ取得：50 Hz

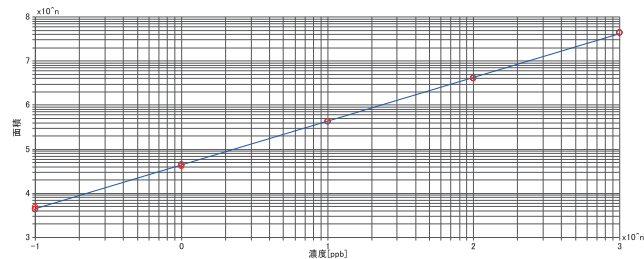
GCxGC 分析や Fast GC 分析では得られるクロマトグラムピーク幅が非常に狭くなるため、使用する質量分析計には高速データ取得能力が求められます。AccuTOF™ GC-Alpha は 1 秒間に 50 スペクトルのデータ取得が可能な性能を有しており、GCxGC 分析、Fast GC 分析にも対応可能です。



軽油の GCxGC/EI TICC

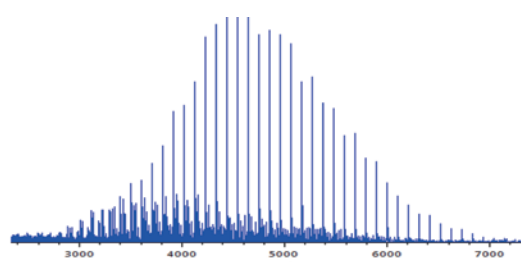
広ダイナミックレンジ：4 桁

OFN 0.1~1,000 pg/μL (濃度範囲 4 桁) を標準 EI イオン源で測定し、高い直線性を確認しました。広いダイナミックレンジは定量分析のみならず、濃度差のある混合試料の定性分析においても有効です。



広質量範囲：~m/z 6,000

飛行時間質量分析計の特長の 1 つとして、広い測定質量範囲があります。通常 GC-MS の質量範囲は m/z 1,000 程度が上限ですが、AccuTOF™ GC-Alpha では m/z 6,000 以上を達成しています。ダイレクト MS 手法である FD 法とこの特長を組み合わせることで、オリゴマーの測定が可能になります。



ポリスチレン 5200 の FD マススペクトル

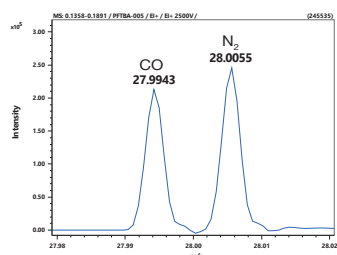
高質量分解能：30,000

高い質量分解能は定性分析に必要な不可欠です。

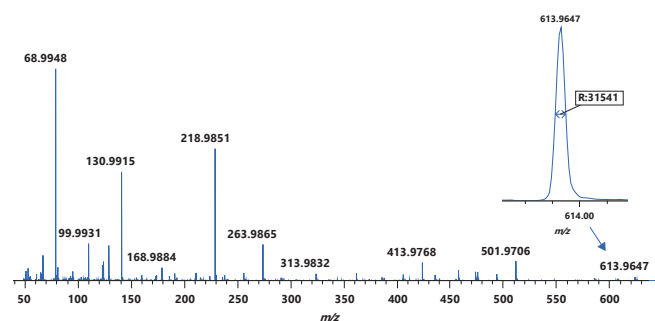
質量分解能は高くなればなるほど観測されるイオンピーク幅は狭くなり、以下に示す特長へと繋がっていきます。

● 近接 m/z イオンを分離して検出可能（右図参照）

● イオンピークの重心位置安定
＝質量精度向上



m/z 28 の質量分離



PFTBA の EI マススペクトル

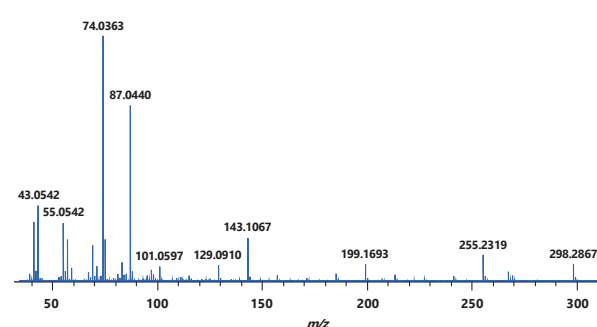
高質量精度：1 ppm^{*1}

* 1 当社規定の検査基準による

高い質量精度により、観測イオンの組成式を一意に決定することが可能です。

質量校正にはドリフト補正マルチプル機能を使用し、ステアリン酸メチルで観測された 10 種のイオンの質量精度平均値（絶対値）は 0.05 mDa、0.45 ppm を達成しました。

| 観測 m/z | 組成式 | 計算 m/z | 誤差 | |
|--------------|--|----------|-------|-------|
| | | | [mDa] | [ppm] |
| 43.0542 | C ₃ H ₇ | 43.0542 | -0.06 | -1.42 |
| 74.0363 | C ₃ H ₈ O ₂ | 74.0362 | 0.10 | 1.40 |
| 87.0440 | C ₄ H ₇ O ₂ | 87.0441 | -0.01 | -0.16 |
| 143.1067 | C ₈ H ₁₆ O ₂ | 143.1067 | 0.03 | 0.22 |
| 185.1537 | C ₁₁ H ₂₁ O ₂ | 185.1536 | 0.05 | 0.26 |
| 199.1693 | C ₁₂ H ₂₃ O ₂ | 199.1693 | 0.04 | 0.19 |
| 213.1850 | C ₁₃ H ₂₅ O ₂ | 213.1849 | 0.08 | 0.39 |
| 255.2319 | C ₁₆ H ₃₁ O ₂ | 255.2319 | 0.03 | 0.11 |
| 267.2683 | C ₁₈ H ₃₅ O | 267.2682 | 0.05 | 0.18 |
| 298.2867 | C ₁₉ H ₃₈ O ₂ | 298.2866 | 0.06 | 0.20 |
| 質量精度平均値（絶対値） | | | 0.05 | 0.45 |



ステアリン酸メチルの EI マススペクトル



高質量分解能がもたらすベネフィット

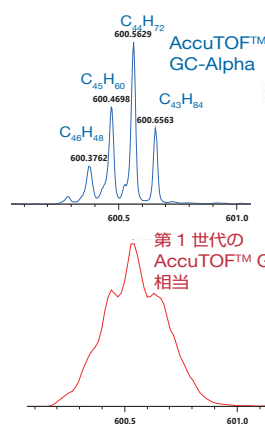
第 1 世代の AccuTOF™ GC と最新の AccuTOF™ GC-Alpha で取得した原油のマススペクトルを比較すると、AccuTOF™ GC-Alpha のデータでは、各イオンを明確に分離して検出できています。

原油のマススペクトルから描画した KMD (Kendrick Mass Defect) プロットでは分解能の差が顕著に現れています。第 1 世代のデータでは、高質量域においてイオンピークが不分離なため正しい解析結果が得られていません。

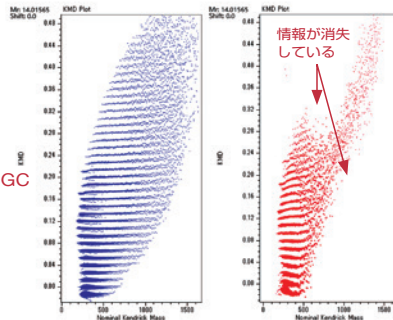
一方 AccuTOF™ GC-Alpha データの KMD プロットは高質量域においてもイオンピークを分離して検出できており、高い不飽和度領域（高い KMD 値）まで結果が得られています。

原油の FD マススペクトル

原油の KMD プロット



左：AccuTOF™ GC-Alpha データ
右：第 1 世代の AccuTOF™ GC 相当データ



高質量精度がもたらすベネフィット

高い質量精度とは、『誤差』が少ないことと同義です。精密質量解析においては誤差を考慮し、『許容誤差』を装置仕様の質量精度値よりも大きい値に設定することが一般的です。しかし許容誤差を大きくすれば組成式候補の数が増え、得られた複数の組成式候補のどれが正しいのか、その判断は難しくなります。

高質量精度を有する AccuTOF™ GC-Alpha は許容誤差を従来機種よりも小さく設定できるため、組成式候補数は少なくなります。組成式候補の絞り込みで頭を悩ませることはありません。

トリラウリンの統合解析結果比較

許容誤差：5 mDa を使用した場合

| # | 組成式 | DBE | 計算 m/z | 誤差 [mDa] | EI フラグメントカバー率 |
|---|--|-----|-----------|----------|---------------|
| 1 | C ₄₀ H ₇₀ N ₄ O ₂ | 8.0 | 638.54933 | 0.07 | 100 |
| 2 | C ₃₉ H ₇₄ O ₆ | 3.0 | 638.54799 | 1.41 | 100 |
| 3 | C ₃₈ H ₆₆ N ₁₀ | 9.0 | 638.54664 | 2.76 | 100 |
| 4 | C ₂₉ H ₇₀ N ₁₀ O ₅ | 0.0 | 638.55252 | -3.12 | 100 |
| 5 | C ₃₅ H ₇₀ N ₆ O ₄ | 4.0 | 638.54531 | 4.09 | 100 |

許容誤差：2 mDa を使用した場合

| # | 組成式 | DBE | 計算 m/z | 誤差 [mDa] | EI フラグメントカバー率 |
|---|---|-----|-----------|----------|---------------|
| 1 | C ₃₉ H ₇₄ O ₆ | 3.0 | 638.54799 | 1.41 | 100 |
| 2 | C ₄₀ H ₇₀ N ₄ O ₂ | 8.0 | 638.54933 | 0.07 | 85 |

許容誤差 5 mDa では EI フラグメントカバー率 100 % が 5 候補

許容誤差 2 mDa では EI フラグメントカバー率 100 % が 1 候補

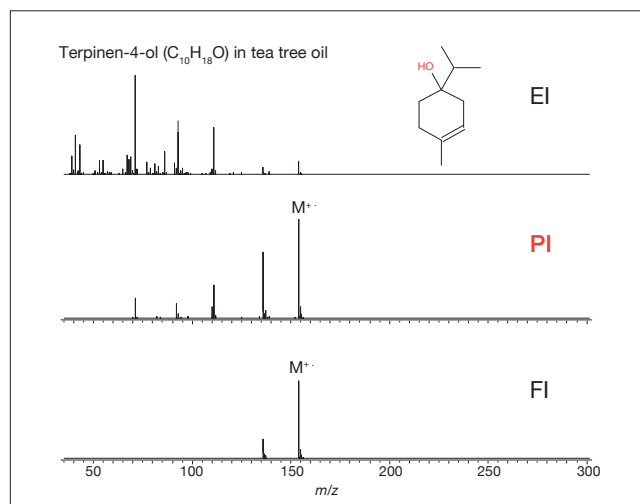
多彩なソフトイオン化が提供する新しい定性分析の世界

AccuTOF™ GC-Alpha ではマルチプルなイオン化法が可能です



定性分析に強力なツールとなるソフトイオン化法

EI法は豊富なライブラリーデータベースが使用可能なため、GC-MSの定性分析に幅広く活用されています。しかし、EI法は最もハードなイオン化法であるため、分子イオン以外にも多くのフラグメントイオンが観測され、分子イオンが全く観測されないこともしばしばあります。そのため、ライブラリーデータベースに未登録の未知成分の場合、EIマススペクトルだけでは観測された最も m/z 値が大きいイオンが分子イオンなのか、それともフラグメントイオンなのか、その判別は困難となります。そのような場合はソフトイオン化法が有効となります。AccuTOF™ GC-Alpha ではFI・PI・CIといった多彩なソフトイオン化法が可能であり、分子イオンやプロトン付加分子といった分子量情報を与えるイオンを観測しやすく、さらに精密質量を組み合わせることによって、未知成分の分子式情報を正確に得ることが可能となります。今まで諦めていた未知成分の定性分析において、EI法+ソフトイオン化法+精密質量解析は強力なツールとなります。



ソフトイオン化法のファーストチョイス FI法とFD法

FI/FD法はハードイオン化法であるEI法や、他のソフトイオン化法(PI法、CI法)に比べ分子イオンの内部エネルギーが少ないイオン化法です。フラグメンテーションが起こりにくい非常にソフトなイオン化法のため、分子量確認のファーストチョイスとして最適です。

FI (Field Ionization : 電界イオン化) 法

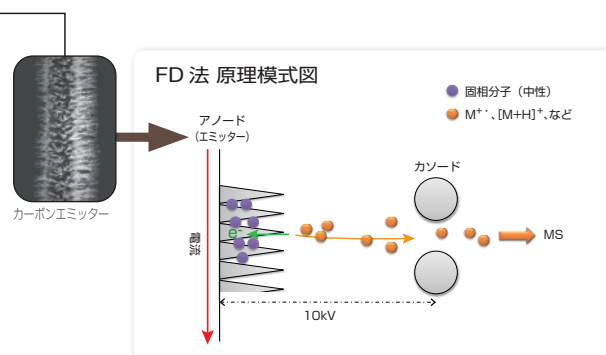
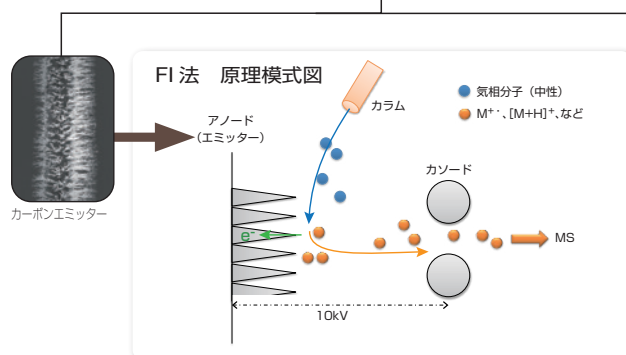
- ▶ 試料をGCや標準試料導入部を介してイオン源に導入できます。
- ▶ CI法では、測定対象化合物により試薬ガス種を選択する必要がありますが、FI法では不要です。

FD (Field Desorption : 電界脱離) 法

- ▶ 試料をエミッター上に塗布し直接導入します。
- ▶ 熱不安定化合物分析に適しています。
- ▶ 非極性溶媒に可溶な試料に適しています。
- ▶ 溶媒に分散可能な粉末試料でも測定可能です。
- ▶ 低～中極性の金属錯体が測定可能です。
- ▶ GC/MSでは測定不可能なポリマーなどの高分子量試料が測定可能です。

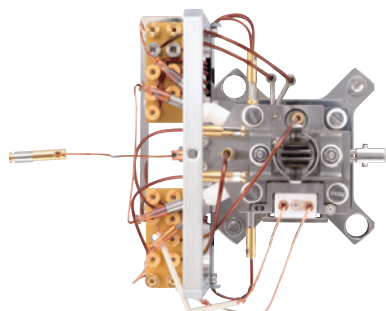


FDプローブ先端



FI法、FD法では、高電界中における分子からの電子の引き抜きによってイオン化が起こります。

電界イオン化法 / 電界脱離法 EI/FI/FD 共用イオン源 (オプション)



EI/FI/FD

EI法 (ハードイオン化法) と FI/FD法 (ソフトイオン化法) を組み合わせた共用イオン源です。イオン源交換、真空解除することなく EI法と FI/FD法の切り替えが可能です。

特長

- ▶ イオン源交換不要
- ▶ 真空解除不要
- ▶ 試薬ガス不要

GC/EI法と GC/FI法を 1つのイオン源で使い分けながら、以下のよう
な分析が可能です。

- ▶ GC/EI法でのライブラリーデータベース検索
- ▶ GC/FI法での分子量確認
- ▶ 精密質量測定

光イオン化法 EI/PI 共用イオン源 (オプション)

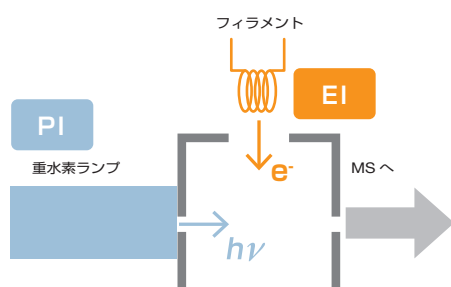


EI/PI

光イオン化 (PI) 法は、真空紫外線 (VUV) ランプを用いたイオン化法であり、EI法 (ハードイオン化法) と PI法 (ソフトイオン化法) を組み合わせた共用イオン源です。EI フィラメントの ON/OFF、PI ランプの ON/OFF を行うだけで、EI法と PI法の切り替えが可能です。

特長

- ▶ イオン源交換不要
- ▶ 真空解除不要
- ▶ 試薬ガス不要

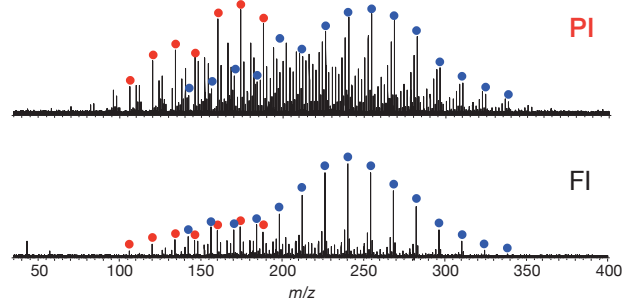


PI 使用時は ランプ：ON、フィラメント：OFF
EI 使用時は ランプ：OFF、フィラメント：ON
で使えます

EI/PI 共用イオン源の概要図

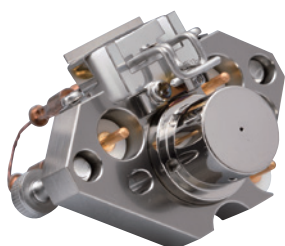
Average mass spectra of diesel fuel

● : *n*-Alkanes
● : Aromatic hydrocarbons



紫外線を強く吸収する芳香族化合物は、PI法で優先的にイオン化されるため、複雑な混合物中の芳香族化合物の分析に有用です。

化学イオン化法 CI イオン源 (オプション)



CI

AccuTOF™ GC-Alpha では、古典的なソフトイオン化法である化学イオン化法 (CI法) にも対応しています。原理的にメタン、イソブタン、アンモニア等の試薬ガスが必要となりますが、CI用試薬ガスラインを 3系統備えているため、試薬ガス切り替えのための面倒なガスボンベの交換は必要ありません。以前から CI法をお使いのお客様にも安心してお使いいただけます。

高性能でありながら簡単・迅速をコンセプトに
「Alpha アルファ」が実現した 2 つの Key Technology



Key Technology 2

簡単・迅速を追求した新世代自動解析ソフトウェア

GC-MS を用いた「未知化合物」の同定方法として、新しいワークフローを考案しました。このワークフローでは、ハードイオン化法である EI（電子イオン化）法により得られたデータと、FI 法などに代表されるソフトイオン化法により得られたデータを統合して解析を実施します。

（特許出願中）

この新しいワークフローを搭載した自動解析ソフトウェア“msFineAnalysis”は、今までにない全く新しいコンセプトのソフトウェアとして、2018 年に上市して以来、沢山のお客様にご使用いただいています。

AccuTOF™ GC-Alpha で取得した高品質な測定データを最大限活用できるソフトウェアです。今まで諦めていた未知化合物の定性解析ソリューションを提供します。

■ バージョン 3 へ進化

msFineAnalysis はバージョン 3 へと進化し、新たに 2 検体比較機能が追加されました。また、操作性も格段に向上し、誰でも簡単にライブラリー未登録成分の定性解析を実施いただけます。

msFineAnalysis の主な特長

- ▶ EI、ソフトイオン化データを組み合わせた 5 つの自動定性解析
- ▶ デコンボリューション機能
- ▶ グループ分析機能
- ▶ 2 検体比較（差異分析）機能
- ▶ EI データ単独でも解析可能

分析者の力強いパートナーとして、msFineAnalysis はデータ解析を高効率・迅速に行います。解析に要する時間は最小限に、結果の考察・研究に時間を優先して割ける時代の到来です。



msFineAnalysis による統合解析

EI 法とソフトイオン化法を組み合わせた自動ノンターゲット分析



作業時間の短縮、作業効率の向上、解析結果の質向上をお約束します

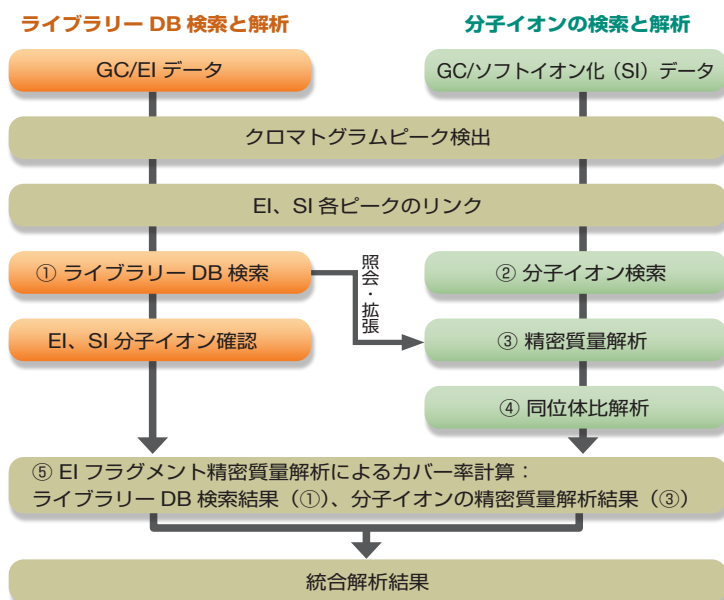
msFineAnalysis を使えば誰でも簡単に EI 法データとソフトイオン化 (FI, PI, CI) 法データを組み合わせた統合解析結果をスピーディーに得ることができます。

msFineAnalysis では従来の TIC/MS ピーク検出と、クロマトグラム分離が不十分な成分までも精密質量情報を生かして分離検出するデコンボリューション検出の 2 つの方法を搭載しています。またバージョン 3 では新たに差異分析機能を搭載しました。これにより、正常品・異常品といった 2 検体の比較と、統合解析を組み合わせた解析が可能になります。

msFineAnalysis は定性分析に対するニーズに応え続けていきます。

統合解析ワークフロー：完全自動化された定性解析

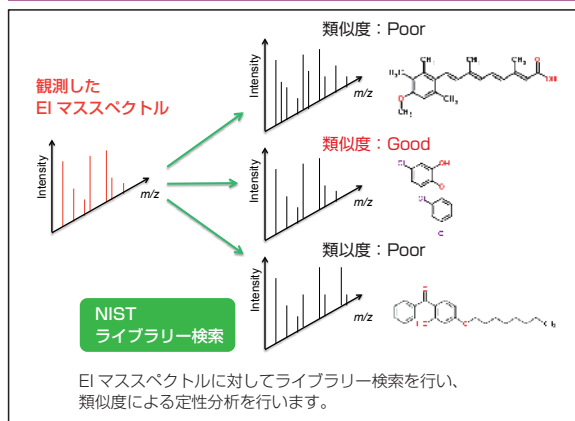
全ての検出成分の分子イオンを自動で選択し、分子式とフラグメントイオン組成式を演算します。ライブラリー未登録成分でも自動で定性解析を実施します。



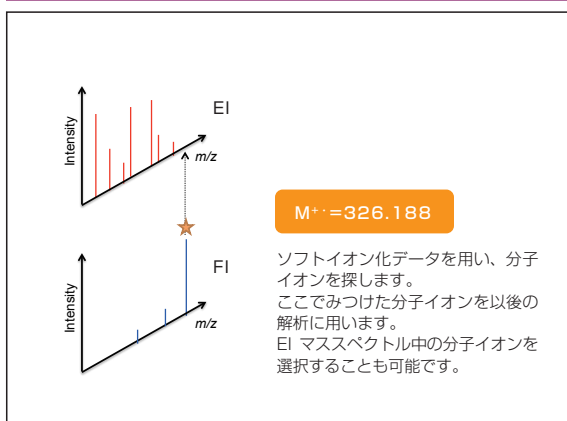
msFineAnalysis は GC/EI データ単独での解析にも対応しています。時間がない、サンプルがないといった理由で EI データしか取得していない場合でも心配はいりません。ライブラリー検索に精密質量解析を加えた、より質の高い検索結果を提供します。

msFineAnalysis による自動解析内容紹介 ～ 検出されたピークに対する5つの解析を組み合わせた自動定性解析処理 ～

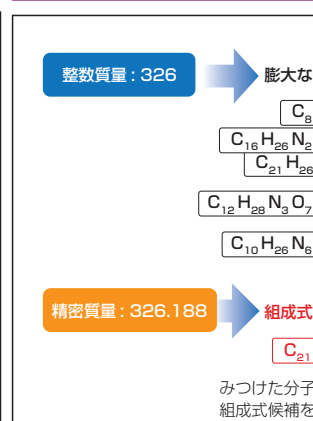
1. NIST ライブラリー検索



2. 分子イオンの探索

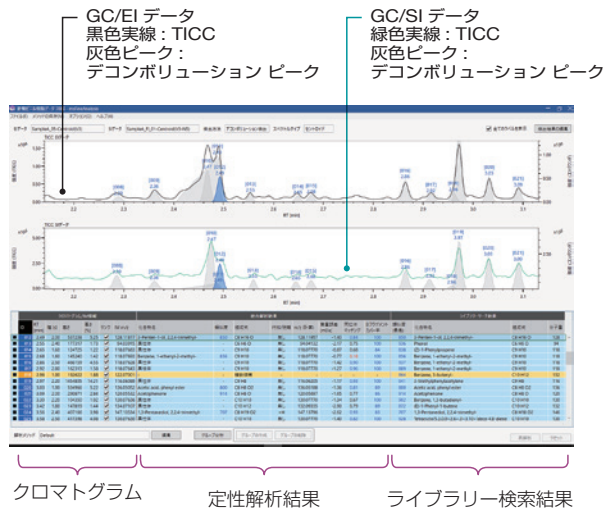


3. 分子イオンの精密質量



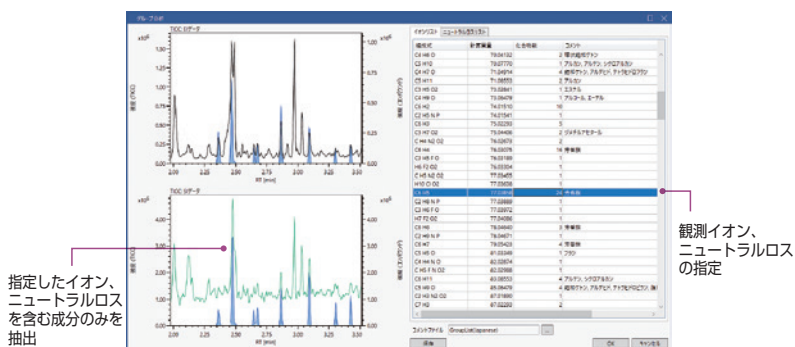
直感的な GUI

一画面で日およびソフトイオン化 (SI) クロマトグラムデータ、クロマトグラム情報、ライブラリー検索結果、精密質量解析結果を確認可能です。



グループ分析機能

グループ分析では指定した観測イオン (分子イオン、フラグメントイオン)、もしくはニュートラルロスを含む成分の解析結果のみを抽出します。フラグメントイオンやニュートラルロスの指定は、共通の部分構造を有している成分の解析に有効です。また分子イオンを指定すれば異性体の分析が可能です。グループ分析では一度に最大 5 つのグループまで抽出することができます。



例えば芳香族化合物に特徴的な $C_6H_5^+$ フラグメントイオンを用いた抽出や、塩素化合物に特徴的な Cl 脱離を用いた抽出などにより、それら化合物群の結果のみを素早く確認することが可能です。

2 検体比較 (差異分析) 機能



2 検体比較機能では、p 値を用いた統計的再現性を縦軸に、2 検体間における強度比を横軸に取った Volcano Plot を採用しており、視覚的に差異成分を見出すことができます。

差異の有無を抽出した後は、全ての成分に対して統合解析が実施されます。

2 検体比較機能では 測定データ数として $n=1, 3, 5$ の設定が可能です。 $n=1$ の場合は統計的再現性を考慮しない単純な強度比較になります。測定データ数を複数用意することが難しい場合でも本機能を活用できます。

解析

組成式候補

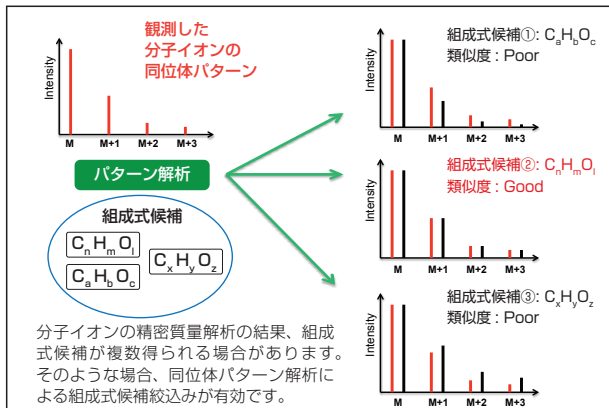
$H_{24}N_5O_5$ $C_{17}H_{22}N_9O$
 O_6 $C_{15}H_{20}N_9$
 $C_{11}H_{22}N_{10}O_2$ $C_{24}H_{24}N$
 O_9 $C_{19}H_{24}N_3O_2$

候補の絞り込み!

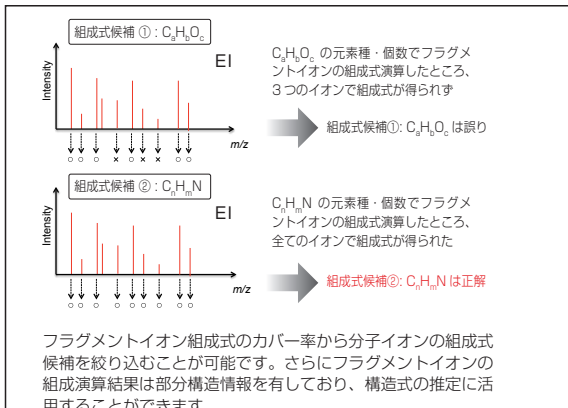
$H_{26}O_3$

イオンの精密質量解析を行い、取得します。

4. 分子イオンの同位体比解析



5. EI フラグメントイオンの精密質量解析



msFineAnalysis が提供する統合解析アプリケーション

msFineAnalysis ではライブラリー登録・未登録問わず、全ての検出成分に対して自動で定性解析を実施します。ソフトイオン化法データから分子式情報（分子イオン、プロトン付加分子等）を、EI 法データから構造情報（フラグメントイオン）を自動で取得します。従来のライブラリー依存の GC/MS 定性分析とは一線を画す“統合解析”を提供します。

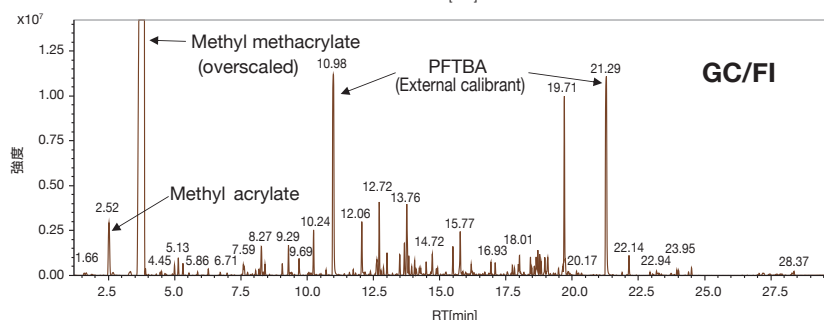
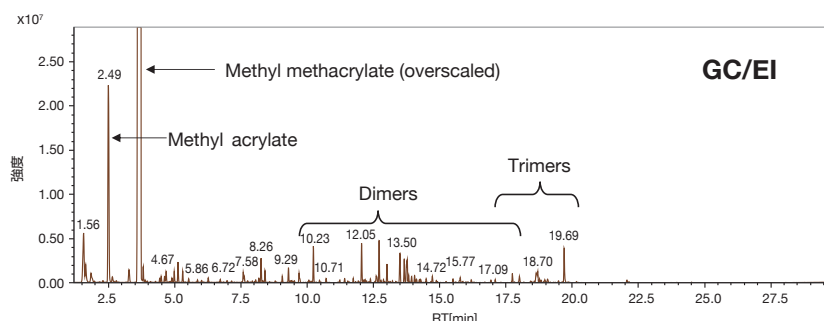
Py/GC/TOFMS によるアクリル樹脂の統合解析 (MSTips No.300)



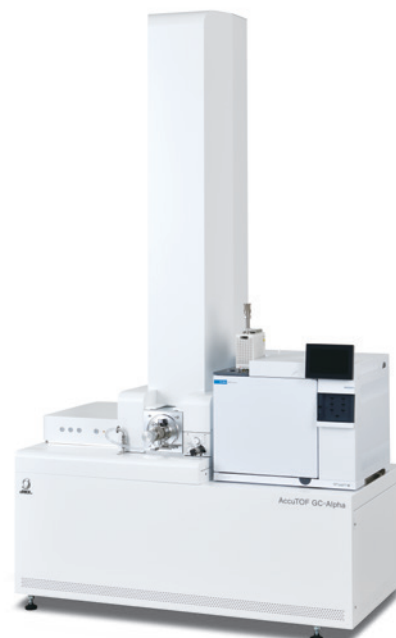
熱分解 GC-MS で困りのあなたへ

ポリマー試料、材料試料を Py/GC/MS 法で測定することで、添加剤情報や高分子構造、重合に関する情報などを得ることができますが、それら成分はライブラリー未登録の場合が多く、従来の GC-MS では同定できないことが多々ありました。

そういったライブラリー未登録成分に対しては、msFineAnalysis の統合解析が有効です。今まで諦めていたポリマー試料、材料試料の解析を、msFineAnalysis がサポートします。



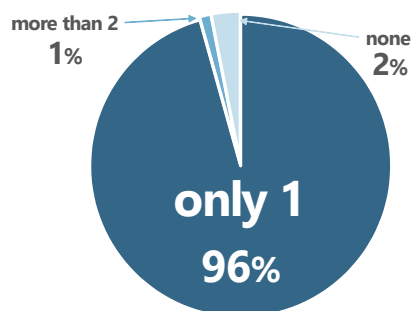
アクリル樹脂の TIC クロマトグラム



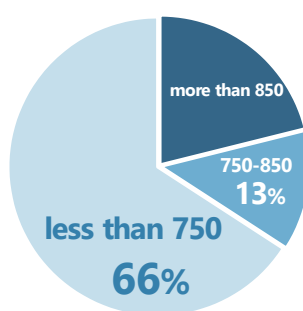
パイロライザー装着例

定性解析結果の比較：

左：msFineAnalysis 統合解析、右：ライブラリー DB 検索



【msFineAnalysis による統合解析】
有意な分子式候補数で分類



【ライブラリー DB 検索のみによる定性解析】
マッチファクタースコアで分類

【msFineAnalysis による統合解析結果】

- ▶ 分子式候補 1 つ：154 成分（96%）
- ▶ 分子式候補複数：2 成分（1%）
- ▶ 分子式候補得られず：5 成分（2%）

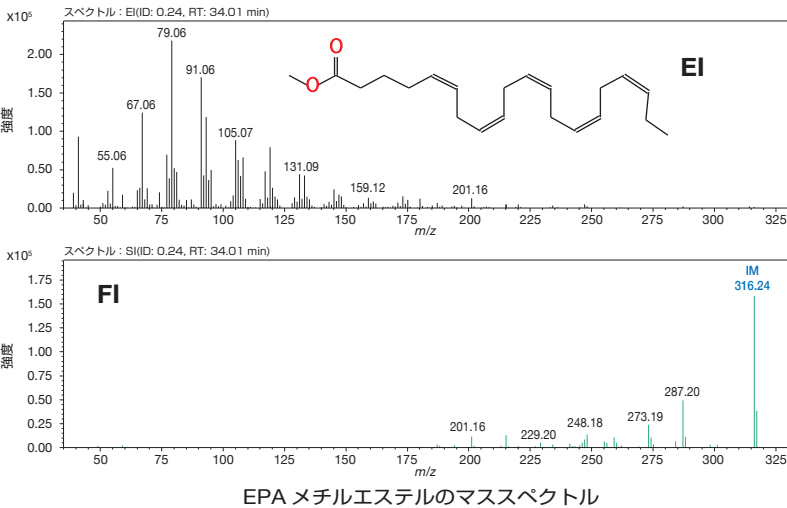
【ライブラリー DB 検索のみによる定性解析結果】

- ▶ スコア 850 以上：34 成分（21%）
- ▶ スコア 750-850：21 成分（13%）
- ▶ スコア 750 以下：106 成分（66%）

通常スコア 750 以下はライブラリー未登録成分である可能性が高く、66%がライブラリー未登録成分である可能性が疑われます。msFineAnalysis はライブラリー未登録成分であっても正しい分子式と構造情報を提供いたします。

GC/TOFMS による脂肪酸メチルエステル類の統合解析 (MSTips No.301)

油脂（トリアシルグリセロール）に含まれる脂肪酸の組成は、油脂を加水分解し、得られた脂肪酸をメチルエステルに誘導体化して GC-MS で測定することによって得られます。エイコサペンタエン酸 (EPA)、ドコサヘキサエン酸 (DHA) などの多価不飽和脂肪酸は、生化学上重要な成分ですが、これらのメチルエステルは H 法では分子イオンが検出できないことが知られています。FI 法は多価不飽和 FAMES の測定に最適です。



市販のFAMES 37 成分混合標準液（Restek 社製、200-600 ng/μL）を測定し、観測した全ての成分のF1 マススペクトル中で分子イオンを確認しました。アルキル基中の二重結合数が5 つのEPA メチルエステルにおいても、F1 マススペクトルでは分子イオンをベースピークとして検出しています。

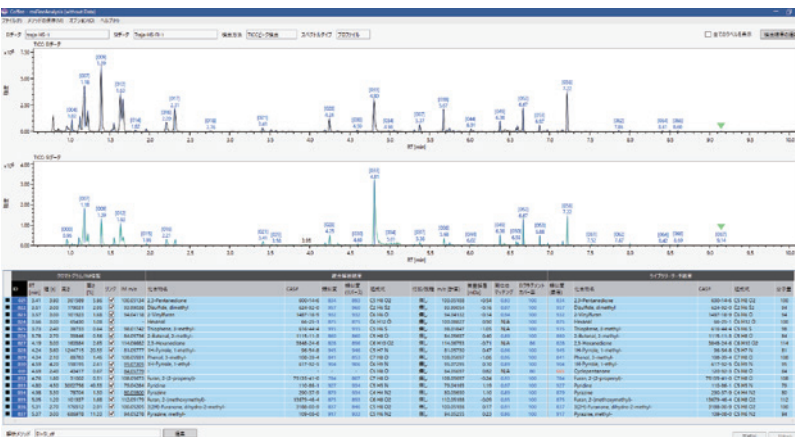
msFineAnalysis の統合解析により、全成分の組成式を得ることができました。ライブラリー検索結果を精密質量解析結果で完全に補完することが可能です。

[illegible]

FAMEs 37 種の統合解析結果

HS/GC/TOFMS によるコーヒー香気成分の統合解析 (MSTips No.280)

ヘッドスペース（Head Space：HS）法は試料中の揮発性成分を測定するための手法です。測定試料をバイアル瓶に密封し、そのバイアル瓶を加熱することで、平衡状態にある気相中の揮発性成分を GC-MS で測定し解析を行います。バイアル瓶に試料を封入するため、液体および固体サンプルの測定が可能です。



コーヒー香気成分の統合解析結果

ドリップ直後のコーヒー 10 mL を HS-GC-TOFMS で分析し、香気成分 67 成分に対して統合解析を実施しました。

コーヒーに特徴的なアルデヒド類、フラン類、ピラジン類などが確認されました。

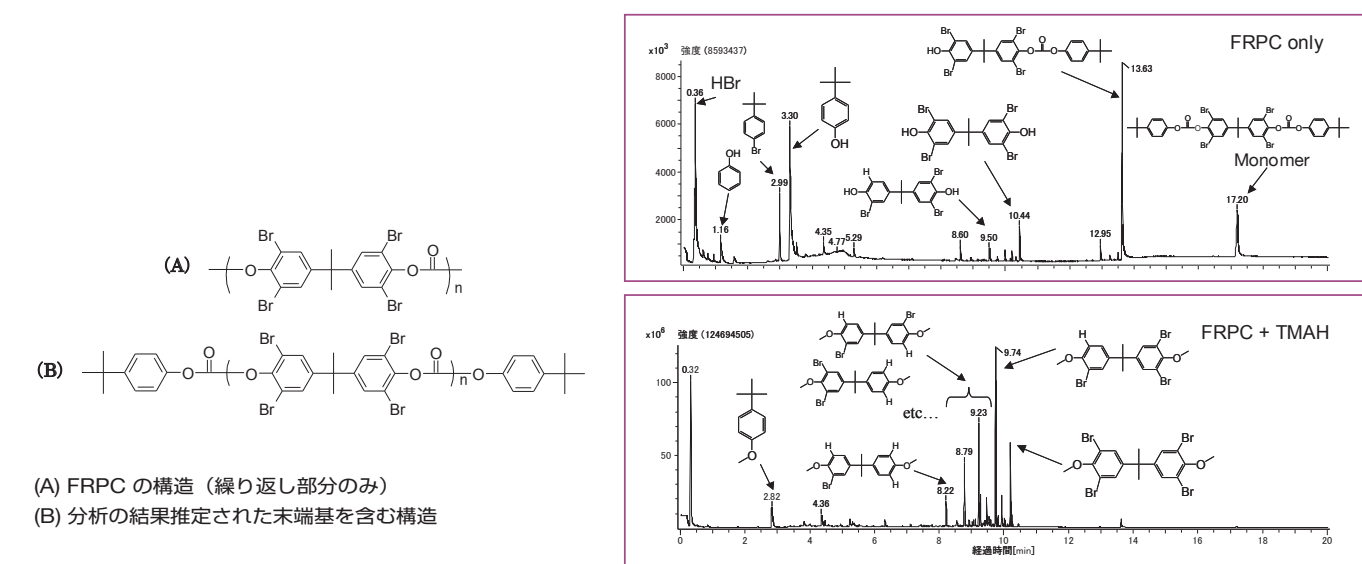
msFineAnalysis は香気成分分析にも威力を発揮します。

AccuTOF™ GC-Alpha が提供するアプリケーション

高分子量臭素化難燃剤の誘導体熱分解による分析 (MSTips No.158)

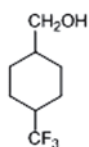
ポリエステルなどの縮合系高分子は熱分解プロセスが複雑で、非常に多種多様な熱分解物が生成され、このためにデータの解析が困難で元の高分子の構造解析に至らないことがあります。このような場合には、誘導体化試薬を添加して熱分解を行う反応熱分解 GC/MS 法が有効です。

芳香族系ポリマー材料用の代表的な難燃剤である、テトラブロモビスフェノール A 型臭素化ポリカーボネート (FRPC; Flame Retardant Polycarbonate) の熱分解 GC/MS を行いました。FRPC のみを熱分解した結果と、FRPC とメチル化試薬である水酸化テトラメチルアンモニウム (TMAH) を混合して行った反応熱分解の結果を比較することで、末端基の構造を推定することができました。TICC 上の各成分の構造は精密質量

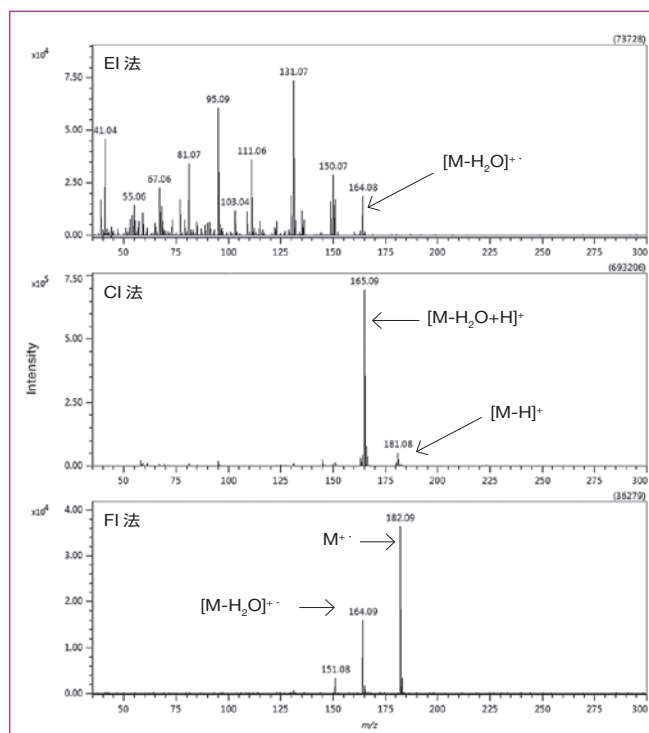


フッ素化合物の分析

EI 法では分子イオンが検出されず、CI 法ではハイドライドイオンの引き抜きによって $[M-H]^+$ が生成し、プロトン付加分子 $[M+H]^+$ と誤認し易いフッ素化合物においても、FI 法では分子イオン M^+ が検出されました。



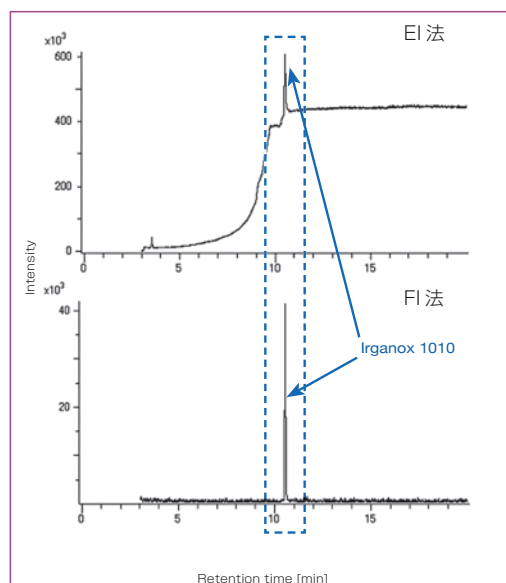
4-(Trifluoromethyl)cyclohexanemethanol
 $C_8H_{13}F_3O$
 Mw : 182.09185



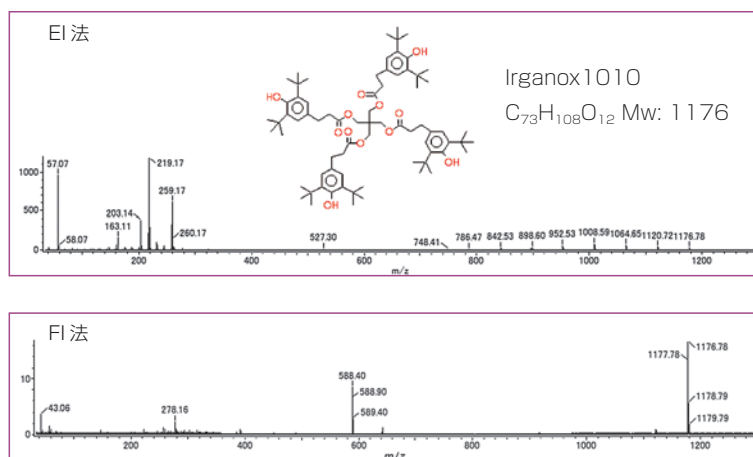
フッ素化合物のマススペクトル

高沸点成分 (酸化防止剤) の分析 (MSTips No.123)

FI 法ではカラムブリード成分がほとんどイオン化されないため、TICC で高沸点成分が容易に確認可能です。



Irganox1010 (酸化防止剤) の TICC



* Irganox は BASF 社の登録商標です。



コールドポイントなし高品質インターフェイス

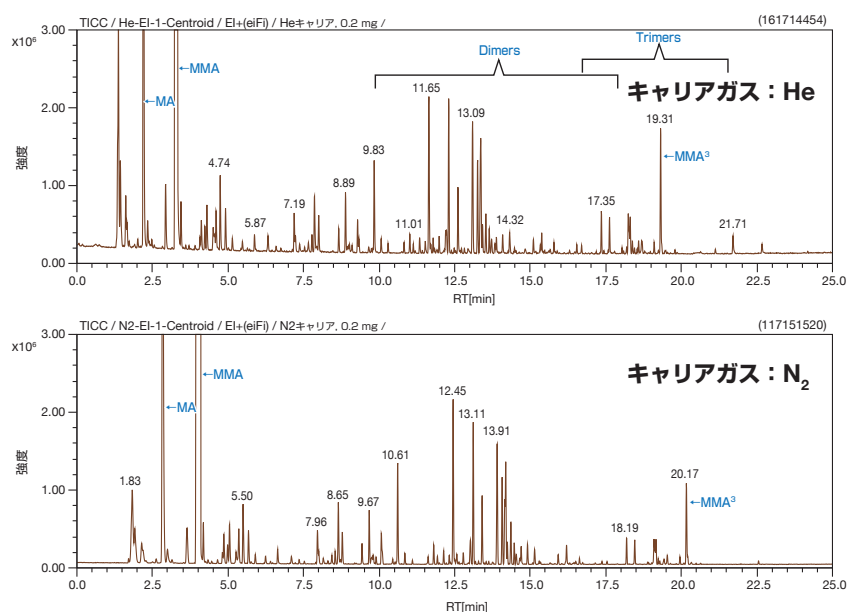
Irganox1010 は GC/MS 分析における高沸点成分測定限界試料です。このような高沸点成分でも TICC はシャープなクロマトグラムが得られ、GC-MS インターフェイスの優れた温度均一性を保証します。

GC キャリアガスとして窒素を用いた分析 (MSTips No.317)

ヘリウムは分子量が小さく、かつ不活性であることから、GC/MS によるノンターゲット分析に使用する GC キャリアガスとして理想的です。水素は従来から GC キャリアガスとして使用されてきた実績がありますが、一部の化合物とは GC 注入口で反応してしまうことが知られており、構造未知の化合物を対象とするノンターゲット分析には適していません。窒素ガスは安価かつ不活性でノンターゲット分析に適していますが、従来型の EI イオン源ではヘリウム使用時と比べて相対的に感度が低下してしまうことが問題でした。

AccuTOF™ GC-Alpha の EI/FI 共用イオン源は、イオン化室（チャンバー）を持たない開放型のため、EI モードで窒素をキャリアガスとして使用した場合にも、ヘリウム使用時と比べて感度低下が殆どありません。また FI モードでは窒素はイオン化されないため、ヘリウム使用時と比べて感度は変化しません。

EI/FI 共用イオン源を用いて、アクリル樹脂の Py/GC/MS 分析を行った結果、感度・GC 分離ともに、同等の結果が得られています。

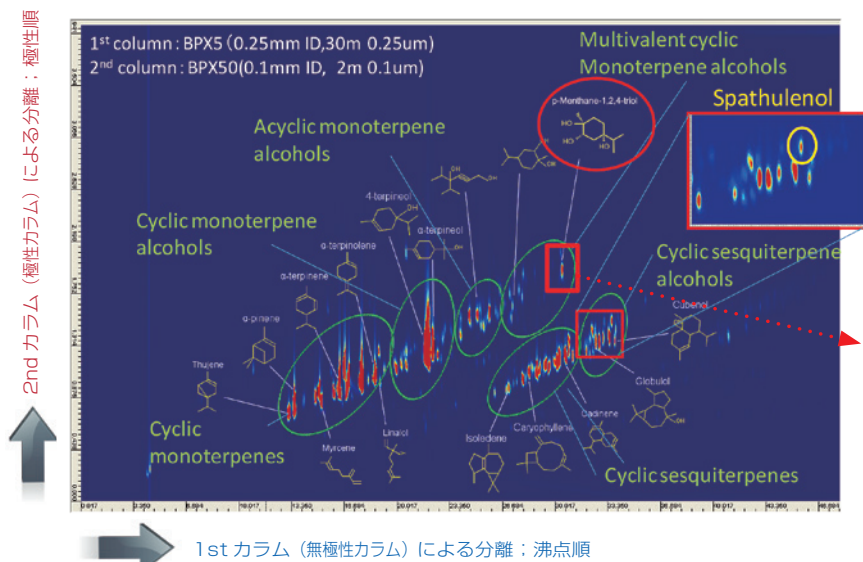


アクリル樹脂を Py-GC-TOFMS で分析した際の TICC の比較
イオン源: EI/FI 共用イオン源 イオン化法: EI

AccuTOF™ GC-Alpha が提供するアプリケーション

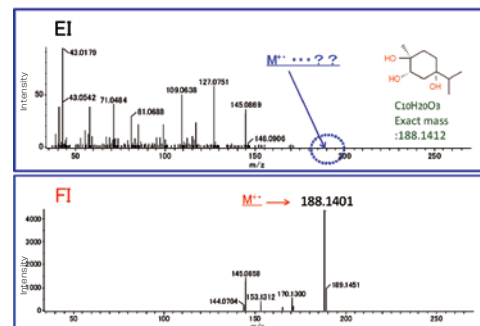
GCxGC/TOFMS によるティーツリーオイル分析 (MSTips No.233)

アロマオイルに含まれる各化合物が十分に分離され、グルーピング化による特徴づけが可能です。
複雑な組成をもつアロマオイル成分を視覚的に捉えることが可能です。



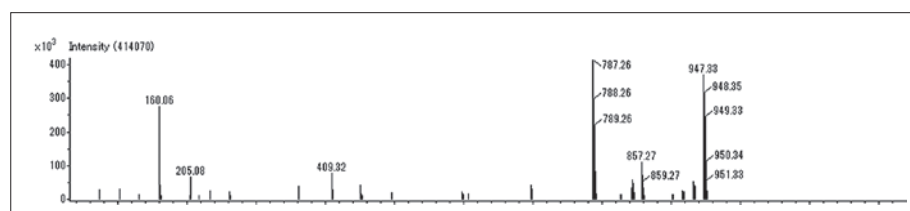
GCxGC/TOFMS による Tea tree oil の 2D TIC

EI 法で分子イオンの得られない化合物については、FI 法を用いて分子イオンを検出、組成推定することで、定性分析の確度を上げることが可能です。



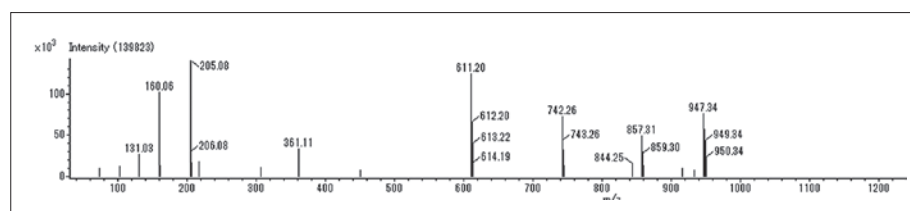
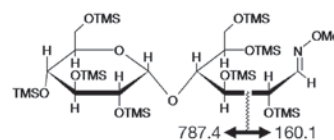
糖類の構造異性体分析 *

二糖類の TMS 誘導体は極めてフラグメンテーションを起こし易く、EI・CI 法では分子イオン、あるいはプロトン付加分子を検出することは困難です。FI 法では分子イオンを明確に検出できることに加え、適度にかかるフラグメンテーションにより構造異性体を識別することが可能です。



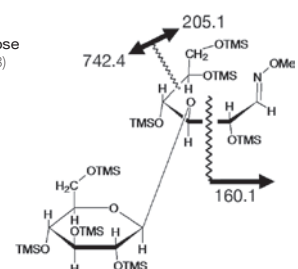
Maltose の TMS 誘導体の FI マススペクトル

Maltose
Glu-Glu (1-4)



Laminaribiose の TMS 誘導体の FI マススペクトル

Laminaribiose
Glu-Glu (1-3)

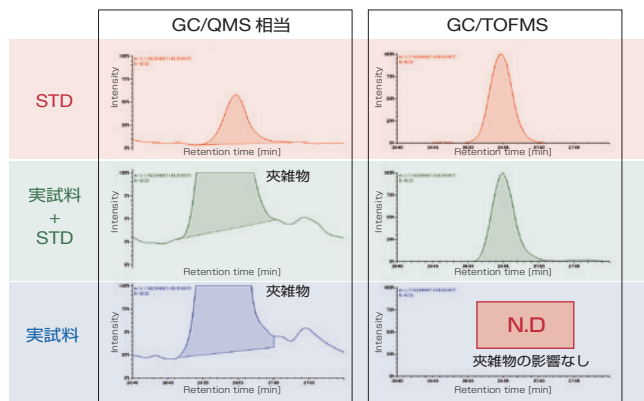


* Furuhashi, T. & Okuda, K. Critical Rev. Anal. Chem., 1 - 16, doi:10.1080/10408347.2017.1320215 (2017).

脂肪酸メチルエステル・二糖 TMS 誘導体試料ご提供：アニコム先進医療研究所 (株) 古橋 剛 様

■ 高選択性

高分解能 TOFMS により、夾雑物の影響を低減することが可能です。選択性の低い装置では検出されてしまう夾雑物由来のピークも、高分解能 TOFMS では格段に検出されにくくなります。高い選択性により、偽陽性の低減、より正確な定量値の算出が可能になります。……………●



にんじん試料中農薬成分の抽出イオンクロマトグラム (EIC)

■ シンプルな条件設定

GC/TOFMS では、設定した m/z 範囲のイオンをすべて検出しているために、SIM (Selected Ion Monitoring) や SRM (Selected Reaction Monitoring) のような煩雑な設定をする必要がありません。また理論上、測定成分数に上限がないため、多成分の一斉分析が可能となります。独自の約 350 成分の精密質量データベースを使用して、簡単な多成分一斉分析が可能です。

■ 高い定性能力

TOFMS は SCAN や SIM のようなモード選択はなく、常に高分解能かつ高質量精度で広い m/z 範囲 (例. m/z 35 ~ 600) を測定します。そのため観測された全てのイオンについて選択性の高いクロマトグラムの作成が可能であり、高い定性能力を有します。ノンターゲット成分についても既に測定したデータから解析可能というメリットがあります。

■ 良好な感度・再現性

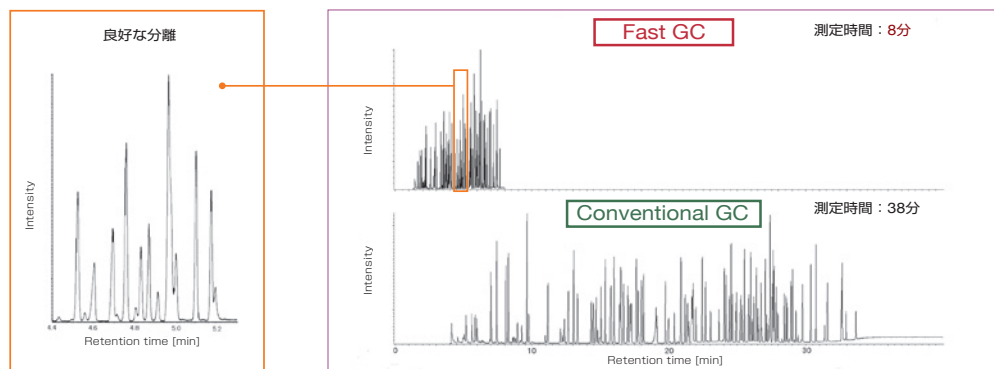
右表は農薬 353 成分の一斉分析を行い、各成分の定量下限値と変動係数を算出した結果です。多成分の一斉分析において、良好な感度・再現性が得られます。……………●

| 定量下限値 (LOQ) | | 変動係数 | |
|--------------------|-----|---------|-----|
| < 0.005ppm | 161 | < 5% | 239 |
| 0.005ppm - 0.01ppm | 174 | 5 ~ 10% | 109 |
| > 0.01ppm | 18 | >10% | 5 |

定量下限値 (LOQ) は、各農薬成分 40 pg (20 ppb × 2 μL) を繰り返し 5 回測定して得られた面積値から算出した標準偏差の 10 倍の値としました。

■ Fast GC によるハイスループット分析

農薬 100 成分を測定して得られたクロマトグラムです。Fast GC 測定 (上図) により、クロマトグラム分離能を保ちながらも従来法 (下図) の 1/4 以下の時間で測定できます。50 スペクトル / 秒の高速データ収集システムが、ハイスループット分析を可能にします。



ダイレクト MS も可能な AccuTOF™ GC-Alpha

GC では難しい高沸点・高質量成分の測定はダイレクト MS モードが有効です



広い測定質量範囲をもつ TOFMS はダイレクト MS モードとの相性が抜群です

通常 GC で測定する化合物は分子量 500 以下のものが多く、分子量 1,000 を超える化合物が対象となることは多くありません。しかし、GC を介さないダイレクト MS モードでは試料をイオン源に直接導入するため、高沸点化合物、高分子量化合物、難揮発性化合物も測定対象となります。AccuTOF™ GC-Alpha の質量範囲は m/z 6,000 以上です。従来の GC-MS より遥かに広い質量範囲での測定が可能のため、ダイレクト MS モードでの測定に最適な装置となっています。

選べる 3 つのダイレクト MS プロブ

■ DEP (Direct Exposure Probe)



プラチナ
フィラメント

- ▶ 溶媒に溶かすか分散させた試料を先端のフィラメントに塗布します
- ▶ 高沸点化合物／熱不安定化合物に最適です
- ▶ EI 法と CI 法が選択可能です

■ DIP (Direct Insertion Probe)



ガラス試料管

- ▶ 固体試料をそのままガラス試料管に導入して測定可能です
- ▶ 高沸点化合物／溶媒に溶けにくい試料に最適です
- ▶ EI 法と CI 法が選択可能です

■ FDP (Field Desorption Probe)



カーボンエミッター

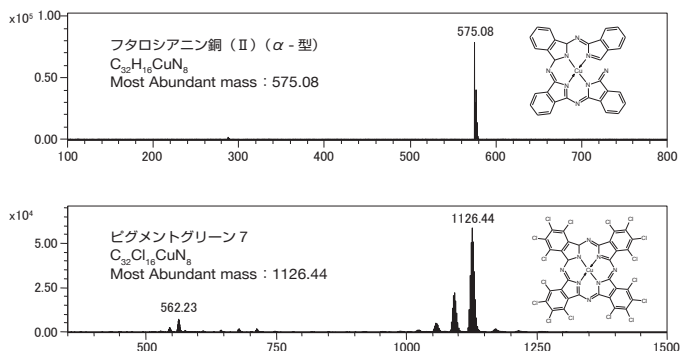
- ▶ 溶媒に溶かすか分散させた試料を先端のカーボンエミッターに塗布します
- ▶ 高沸点化合物／高分子量試料／熱不安定化合物に最適です
- ▶ 低～中極性の金属錯体が測定可能です
- ▶ FD 法で使用します



ダイレクト MS プロブ装着外観

FD 法による顔料測定

溶媒に溶けない顔料のような試料でも FD 法では測定が可能です。FD マススペクトルで分子イオンを明瞭に検出することができています。



顔料の FD マススペクトル

FD サンプリングツール

FD 法専用のサンプリングツールを使うことで、誰でも簡単にエミッター上に試料を塗布することが可能です。

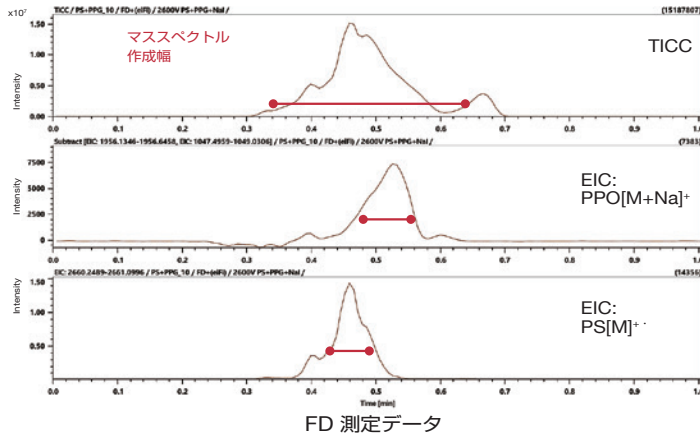


FD サンプリングツール

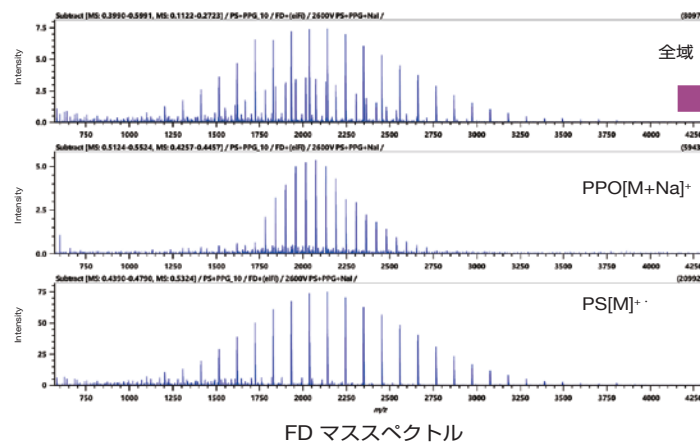
FD 法によるポリマー測定と KMD 解析

FD 法ではエミッターに供給する電流値を上昇させながら測定を行い、高電界と合わせて試料分子を脱離イオン化します。イオン化が起こる電流値は試料によって異なるため、脱離イオン化するポリマー種が測定時間により変化します。混合物の測定においてもある程度の成分分離が可能のため、各々の成分由来のマススペクトル作成が可能です。

また脱離イオン化する時間が近くスペクトル上での成分分離がうまくいかない場合でも、KMD プロットを作成することで目的成分を明瞭に抽出することが可能です。

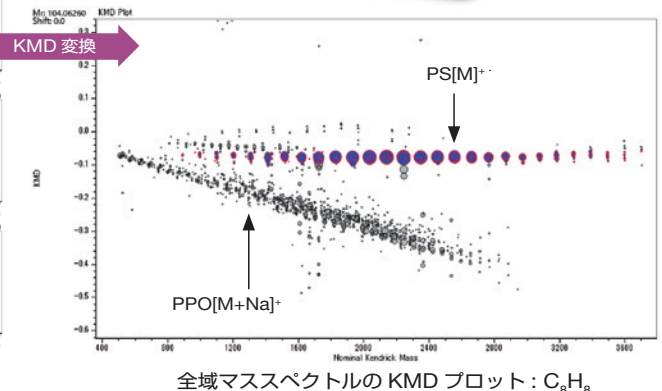


FD 測定データ



FD マススペクトル

KMD 変換



全域マススペクトルの KMD プロット: C_8H_8

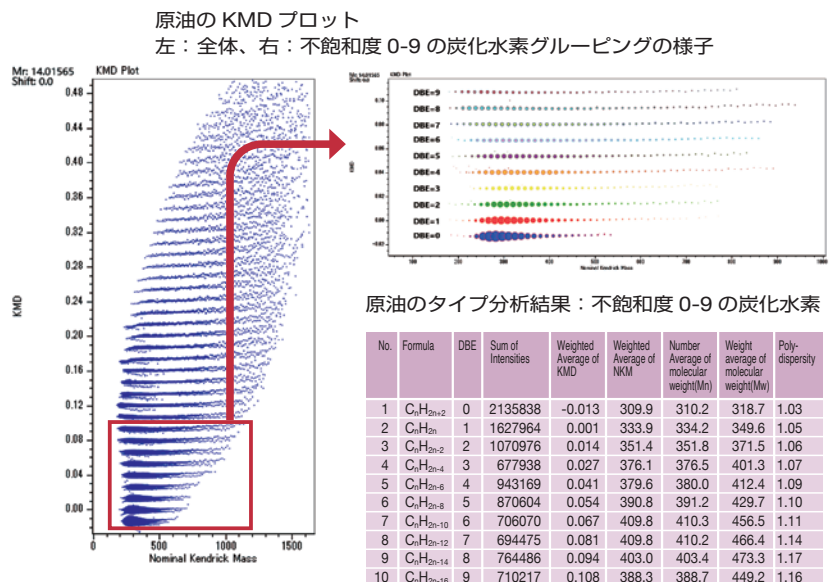


msRepeatFinder によるタイプ分析 —強度合算値、平均分子量の計算—

msRepeatFinder は複雑なマススペクトルを KMD プロットにより可視化することで、同じ繰り返し単位をもつポリマーや炭化水素化合物などを解釈しやすくする解析ソフトウェアです。右図は原油 FD マススペクトルの KMD プロットですが、不飽和度が異なる炭化水素化合物シリーズを可視化することで、各シリーズの解析・グルーピングが容易となっています。また各シリーズをグルーピングすることで、

- ▶ 強度の合算値
- ▶ 数平均分子量
- ▶ 重量平均分子量

などのタイプ分析結果がグループ毎に自動で計算されます。KMD プロットでスペクトルを可視化した後、タイプ分析で詳細な解析を行うことが可能です。



原油のタイプ分析結果：不飽和度 0-9 の炭化水素

| No. | Formula | DBE | Sum of Intensities | Weighted Average of KMD | Weighted Average of NKM | Number Average of molecular weight(Mn) | Weight average of molecular weight(Mw) | Poly. dispersity |
|-----|----------------|-----|--------------------|-------------------------|-------------------------|--|--|------------------|
| 1 | $C_{10}H_{18}$ | 0 | 2135838 | -0.013 | 309.9 | 310.2 | 318.7 | 1.03 |
| 2 | $C_{10}H_{16}$ | 1 | 1627964 | 0.001 | 333.9 | 334.2 | 349.6 | 1.05 |
| 3 | $C_{10}H_{14}$ | 2 | 1070976 | 0.014 | 351.4 | 351.8 | 371.5 | 1.06 |
| 4 | $C_{10}H_{12}$ | 3 | 677938 | 0.027 | 376.1 | 376.5 | 401.3 | 1.07 |
| 5 | $C_{10}H_{10}$ | 4 | 943169 | 0.041 | 379.6 | 380.0 | 412.4 | 1.09 |
| 6 | $C_{10}H_8$ | 5 | 870604 | 0.054 | 390.8 | 391.2 | 429.7 | 1.10 |
| 7 | $C_{10}H_6$ | 6 | 706070 | 0.067 | 409.8 | 410.3 | 456.5 | 1.11 |
| 8 | $C_{10}H_4$ | 7 | 694475 | 0.081 | 409.8 | 410.2 | 466.4 | 1.14 |
| 9 | $C_{10}H_2$ | 8 | 764486 | 0.094 | 403.0 | 403.4 | 473.3 | 1.17 |
| 10 | $C_{10}H$ | 9 | 710217 | 0.108 | 388.3 | 388.7 | 449.2 | 1.16 |

ニーズに対応した前処理装置

熱分解

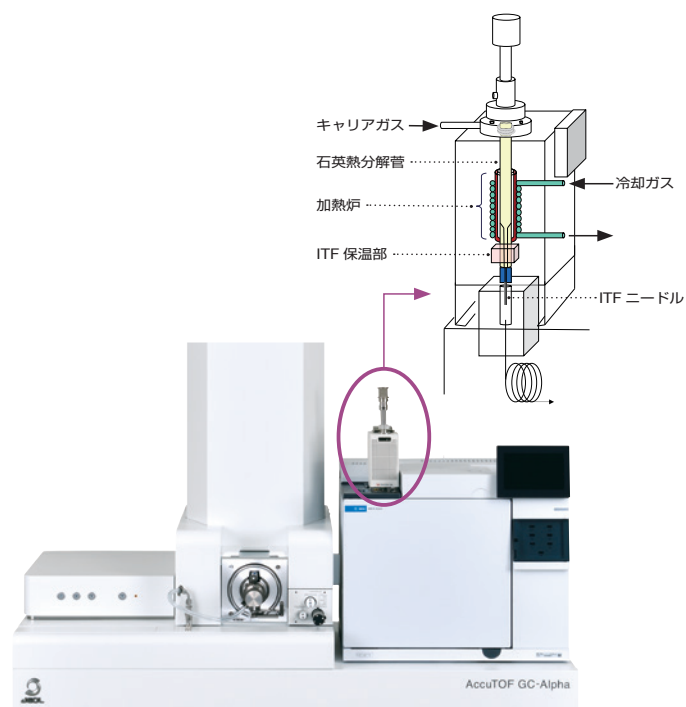
熱分解装置パイロライザー (Pyrolyzer: Py) は、ポリマーのような固体試料の GC/MS 測定を可能とする前処理装置として、今や材料分析分野ではなくてはならない存在となっています。

パイロライザーの加熱炉内で試料を加熱することにより、

- ▶ 試料から発生する揮発性成分
- ▶ 試料の熱分解生成物

などの成分が生じます。それら成分を GC-MS 測定・解析することで試料に関する情報を取得します。試料は小さな金属製のカップに入れて分析に供するため、カップに入る範囲であれば固体および液体試料の分析が可能です。元来、高分子材料の構造解析を行うことを目的として開発された手法であるため、分析に供することのできるサンプル量は少量であることが一般的です。

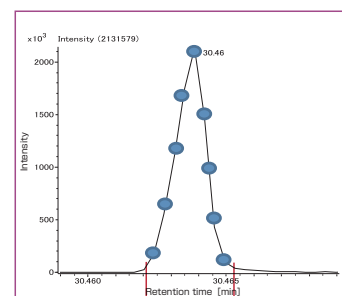
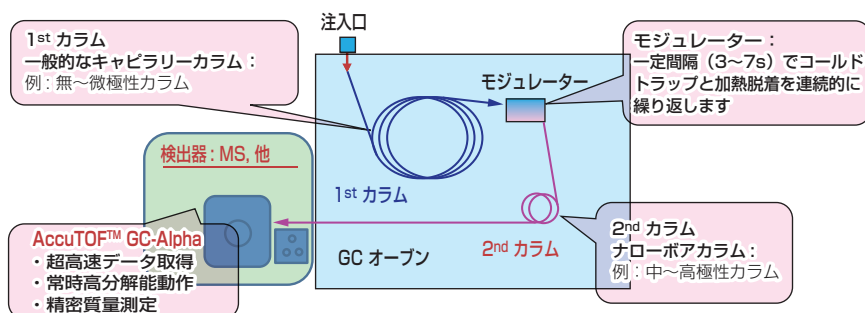
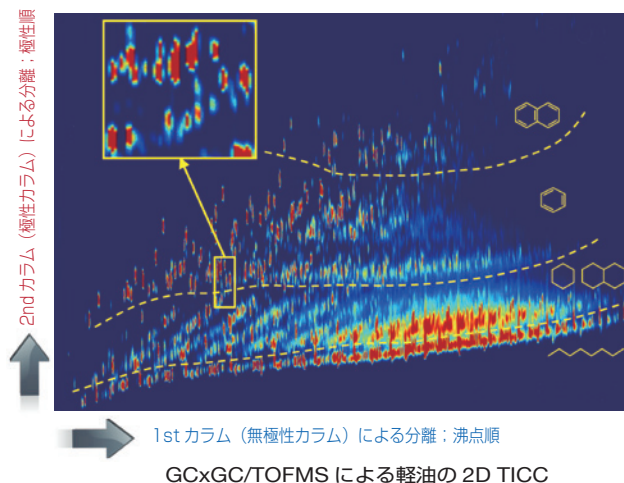
フロンティア・ラボ (株) 製多機能パイロライザーを装着することにより、高分子材料の構造解析に有用な熱分解分析に加えて、最適な熱分解温度を見出すために有用な、発生ガスの直接分析 (EGA) も可能です。更に選択的試料導入装置・マイクロジェットクライオトラップなどのオプションを加えることで、特定の温度範囲で発生した成分の GC/MS 分析を行う、発生ガス - ハートカット - GC/MS のような高度な分析も可能となります。



GC x GC (包括的二次元 GC)

極性の異なる 2 種類の柱を直列に接続し、1st カラムで溶出した成分をモジュレーターにて一定間隔毎にトラップし、トラップされた成分を 2nd カラムで高速分析する連続的なハートカットシステムです。そのため従来のキャピラリー GC よりも高い分離能を有し、「究極のキャピラリー GC 手法」とも言われています。一般的なキャピラリー GC に比べて得られるクロマトグラムのピーク幅が非常にシャープなため、高速取り込み可能な検出器が必要になります。

AccuTOF™ GC-Alpha は最高で毎秒 50 スペクトルを取得しながら、EI 法・FI 法・PI 法・CI 法を用いた精密質量測定が可能です。GCxGC の超高分離能を活かした微量成分のノンターゲット定性分析に威力を発揮します。



ピーク幅: 0.18 s

データポイント = 9 ポイント

熱重量・示差熱分析 (TG/DTA)

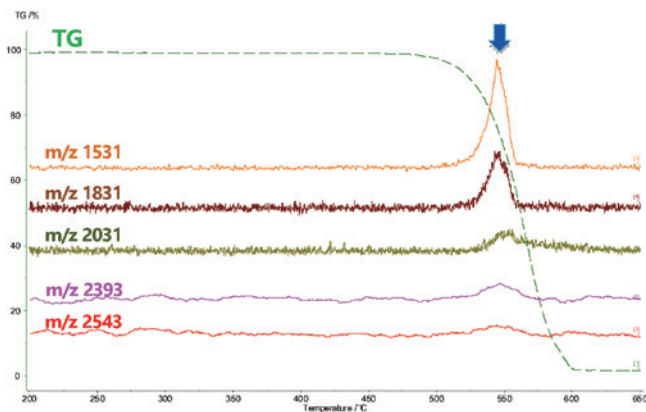
試料を決まった手順で加熱した際の重量変化、および温度（熱）変化を測定することにより、試料の物性評価を行うために使用される手法です。試料の重量変化および温度（熱）変化に伴い発生する成分をリアルタイムに MS で測定し、物性評価をより詳細に行うことが可能となります。

ソフトイオン化法で得られる分子イオンの精密質量を測定することで、熱分解で生成する有機物の元素組成を推定することが可能です。発生ガスの分析においても、高い質量分解能により、例えば $\text{CO}^+/\text{N}_2^+/\text{CH}_2\text{N}^+/\text{C}_2\text{H}_4^+$ のような同重体イオン（整数質量は全て 28 Da）の時間変化を独立してモニターすることが可能です。

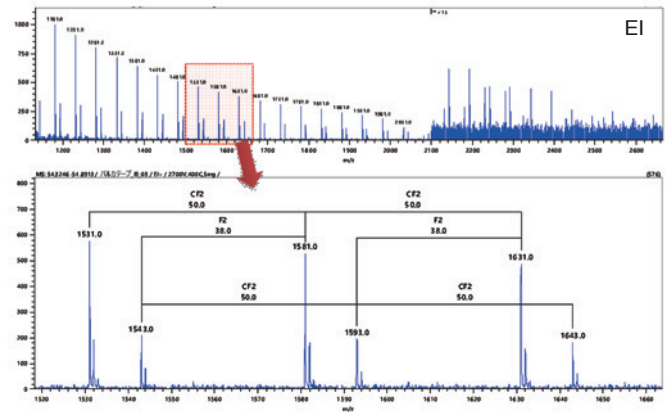


フッ素樹脂の熱分析例 (MSTips No.249)

フッ素樹脂由来の繰り返し単位を持つ高質量イオン (m/z 2,500 付近まで) が多数観測されました。TG-TOFMS は測定可能な質量範囲が通常の TG-QMS よりも広く、オリゴマー領域の合成高分子の測定に使用できることが示されました。



TG 曲線と、高 m/z イオンの抽出イオンクロマトグラム

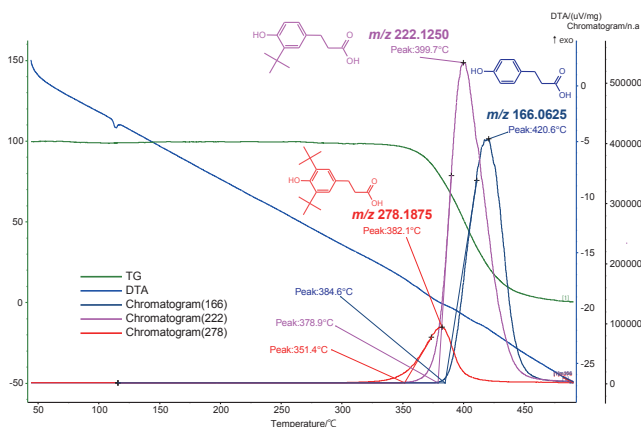


TG 曲線中に示した青矢印位置の EI マススペクトル

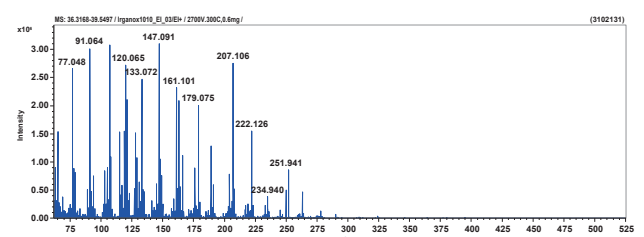
酸化防止剤の熱分析例 (MSTips No.250)

PI マススペクトルで観測された m/z 166, 222, 278 は精密質量解析の結果から、酸化防止剤の主構造の一部が外れて低分子化した構造を有していると推測しました。

クロマトグラム分離がない TG-MS においては、ソフトイオン化法と TOFMS の特長である精密質量分析を組み合わせることで、同時に観測される複数成分の定性分析を行えます。合成高分子の母材や添加剤などの詳細な熱分析・解析を行う上で、TG-TOFMS は強力な分析ツールになると考えられます。



TG/DTA 曲線と、酸化防止剤熱分解物の抽出イオンクロマトグラム



アプリケーションの幅を広げるソフトウェア

メインプログラム msAxel

■ オートチューニング機能

高分解能 MS から連想しがちな煩雑なマニュアルチューニングは必要ありません。

オートチューニング機能を用いれば、EI、CI、FD、FI、PI すべてのイオン化モードにおいて、容易に最適な装置条件に調整することができます。

■ 充実した自動化機能

▶ 自動ドリフト補正機能

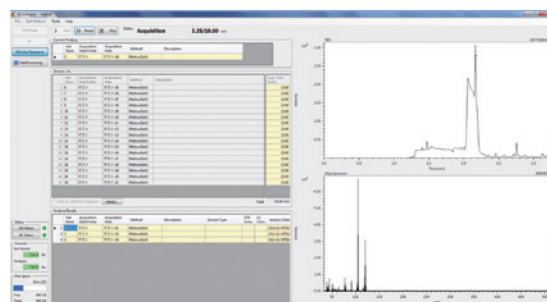
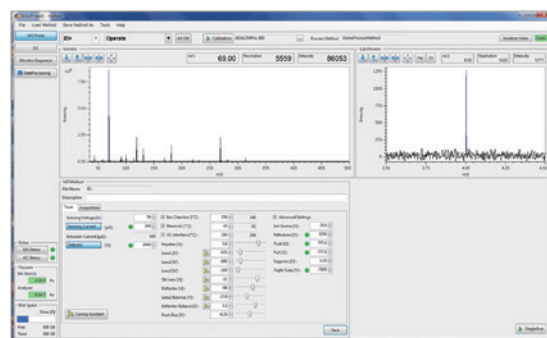
データ取得後、すべてのスペクトルに対して自動でドリフト補正を行います。

▶ 自動データ変換機能

データ取得後、測定データを netCDF 形式のデータフォーマットに自動で変換します。

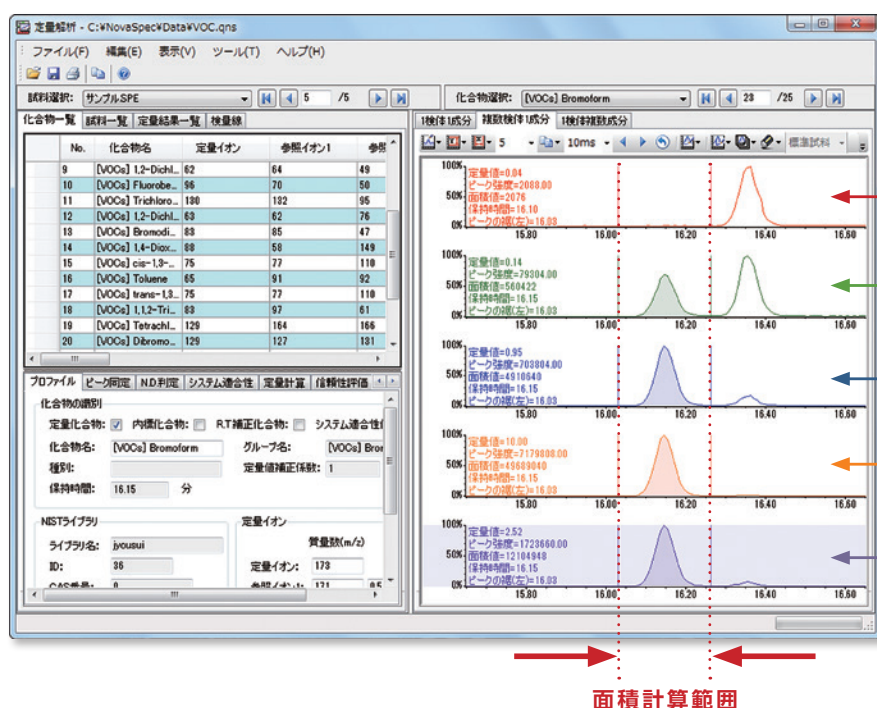
▶ 自動データ転送機能

測定終了後、測定データを任意の保存領域（解析用 PC のハードディスクなど）に自動で転送します。



多成分定量処理プログラム Escrime™ (オプション)

AccuTOF™ GC-Alpha で測定したデータは、多成分定量処理プログラム Escrime™ を用いて、定量処理を行うことが可能です。定量に使われるEICの作成については「ウィンドウ幅」を自由に設定でき、高分解能状態でのEICをベースに定量処理が可能です。クロマトグラムピークの面積計算、検量線の作成、定量値の算出を自動で行うことはもちろん、その後の面積計算範囲の個別設定、一括変更、定量イオンの変更が行え、定量計算処理にかかる時間を大幅に短縮できます。



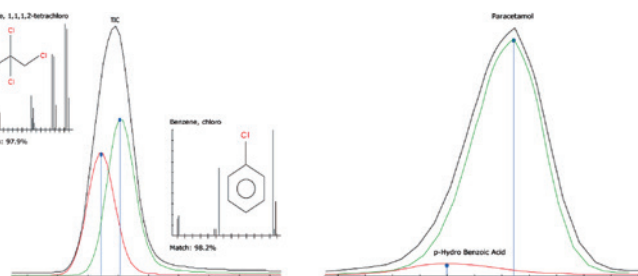
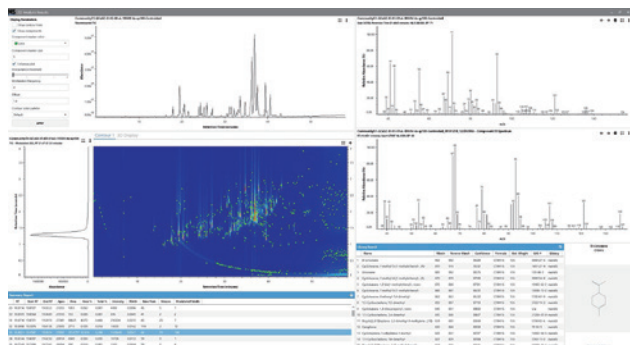
複数検体に含まれる成分ピーク、または一検体中の複数成分ピークを同一画面上に表示できます。

また、ピーク面積計算範囲を同時に変更でき、多検体が一括に処理できます。

MS スペクトル用データマイニングソフトウェア AnalyzerPro (オプション)

AnalyzerPro は MS スペクトル用のデータマイニングソフトウェアです。追加情報が必要な不明瞭なピークをデコンボリューション機能により成分ごとの MS スペクトルに分別することが可能になりました。メタボロームや食品成分分析など各種低分子混合解析において幅広くご利用いただくことが可能です。

また、これら領域で使われる統計解析ソフトウェアとのインターフェイスとしてもご利用可能です。



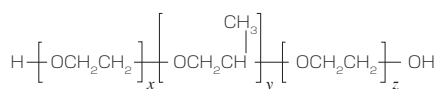
主な機能

- ▶ デコンボリューション (成分抽出)
- ▶ 定性・定量分析
- ▶ ターゲット成分ライブラリ作成・検索
- ▶ NIST ライブラリー検索
- ▶ 複数サンプル成分をまとめて Excel へ出力
- ▶ 簡単な統計解析・可視化
- ▶ GCxGC・DART データ分析

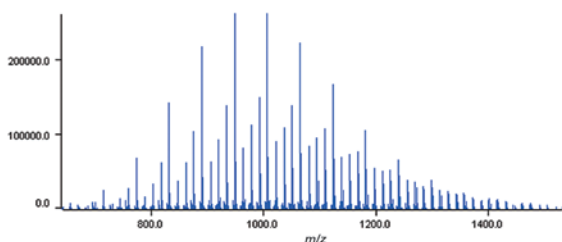
ポリマー解析用タイプ分析プログラム Polymerix (オプション)

FD 法では主に M^+ 、 $[M+H]^+$ 、 $[M+Na]^+$ のような分子量を反映したイオンが観測されるため、合成ポリマーなどを FD 法で測定したマスペクトルの各ピークの m/z とその存在量から平均分子量、重合度、多分散度などが算出可能です。Polymerix は FD 法のデータからポリマーの平均分子量、重合度などを算出するだけでなく、繰り返し単位の構造や末端基の推定を行うことが可能なプログラムです。また、繰り返し単位として CH_2 を指定することにより、FD 法、GC/MS 法で測定された炭化水素試料のタイプ分析を行うことができます。

下記の例は、エチレンオキシド/プロピレンオキシド (EO/PO) ブロック共重合体の各分子の相対存在量 (分布) を視覚化した結果を示しています。



EO/PO ブロック共重合体



EO/PO ブロック共重合体の FD マスペクトル

| Repeat B, EO: (C ₂ H ₄ O) _n | | | | | | | | | | | |
|--|-------|------|------|------|------|------|------|-----|-----|-----|-----|
| | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
| 6 | | | | | | | | | | | |
| 7 | | | | | | | | | | | |
| 8 | | | | | | | | | | | |
| 9 | | | | | 108 | 166 | 127 | 133 | 161 | | |
| 10 | | | 163 | 217 | 419 | 424 | 304 | 226 | 258 | 172 | |
| 11 | 265 | 342 | 509 | 617 | 820 | 760 | 581 | 463 | 434 | 242 | |
| 12 | 958 | 1037 | 1254 | 1400 | 1599 | 1309 | 923 | 562 | 432 | 327 | 219 |
| 13 | 2598 | 2380 | 2346 | 2420 | 2393 | 1779 | 1239 | 736 | 681 | 356 | 224 |
| 14 | 5436 | 3941 | 3520 | 3116 | 2641 | 2061 | 1398 | 937 | 703 | 481 | 282 |
| 15 | 8318 | 5275 | 4308 | 3449 | 2819 | 1984 | 1431 | 997 | 635 | 297 | 214 |
| 16 | 9999 | 5693 | 4144 | 3228 | 2535 | 1800 | 1260 | 869 | 650 | 350 | 109 |
| 17 | 10000 | 5272 | 3653 | 2654 | 2038 | 1420 | 1073 | 667 | 361 | | |
| 18 | 8489 | 4117 | 2792 | 2053 | 1696 | 992 | 772 | 455 | 309 | 137 | |
| 19 | 6364 | 2920 | 1925 | 1466 | 1089 | 726 | 405 | 316 | 173 | | |
| 20 | 4033 | 1986 | 1374 | 946 | 685 | 496 | 156 | 169 | | | |
| 21 | 2517 | 1141 | 893 | 577 | 450 | 304 | 211 | | | | |
| 22 | 1463 | 735 | 367 | 355 | 294 | | | | | | |
| 23 | 794 | 408 | 186 | | | | | | | | |
| 24 | 444 | 256 | | | | | | | | | |
| 25 | 169 | | | | | | | | | | |
| 26 | | | | | | | | | | | |

| Mn | Mw | Mz | PD |
|--------|--------|--------|-----|
| 1053.2 | 1077.1 | 1100.9 | 1.0 |

Mn : 数平均分子量
 Mw : 重量平均分子量
 Mz : Z 平均分子量
 PD : 多分散度 (Mw/Mn)

EO/PO ブロック共重合体の各分子の分布

日本電子の質量分析計ラインナップ

GC-MS シリーズ



ガスクロマトグラフ四重極質量分析計
JMS-Q1500GC UltraQuad™ GC/MS

クラス最高の感度を実現したガスクロマトグラフ四重極質量分析計です。高精度双曲型四重極により高感度を実現し、環境分野、食品分野、化成品等様々な分野へ使用されています。オプションで PI イオン源もご用意し、ポリマー材料や添加剤の分析をはじめ、電池や材料の発生ガスなど様々な試料の分析が可能です。



ガスクロマトグラフ三連四重極質量分析計
JMS-TQ4000GC

JMS-Q1500GC の特長を継承しながらも、日本電子独自のショートコリジョンセルを採用し、ハイスループットでありながら高感度分析が可能なガスクロマトグラフ三連四重極質量分析計です。ショートコリジョンセルのイオン蓄積機能と蓄積されたイオンの瞬間排出により、高速 SRM 測定においても高感度で高い選択性を実現します。

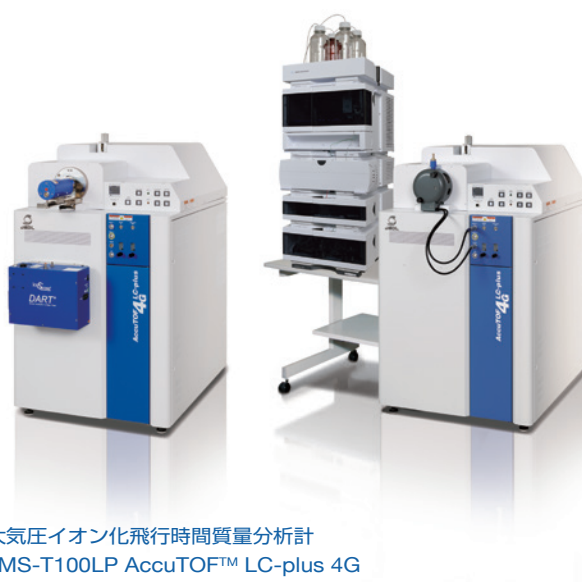
MALDI-TOFMS



マトリックス支援レーザー脱離イオン化飛行時間質量分析計
JMS-S3000 SpiralTOF™-plus

独自の SpiralTOF™ イオン光学系を採用した超高分解能・高感度マトリックス支援レーザー脱離イオン化飛行時間質量分析計 (MALDI-TOFMS) です。JMS-S3000 はマスマイメーキング機能を大幅に向上し、SpiralTOF™-plus へと進化しました。分析技術の最先端をリードし、合成高分子・材料科学・生体高分子などの幅広い分野で日々変化していく研究ニーズにお応えします。

LC-MS、DART-MS



大気圧イオン化飛行時間質量分析計
JMS-T100LP AccuTOF™ LC-plus 4G

シンプル・堅牢かつオールラウンドな大気圧イオン化飛行時間質量分析計です。LC/MS 用イオン源として最も広く使われているエレクトロスプレー (ESI) イオン源に加え、日本電子独自のイオン化技術である DART™ (Direct Analysis in Real Time)、Cold Spray を搭載することにより、幅広い分析にソリューションを提供します。

装置仕様・構成

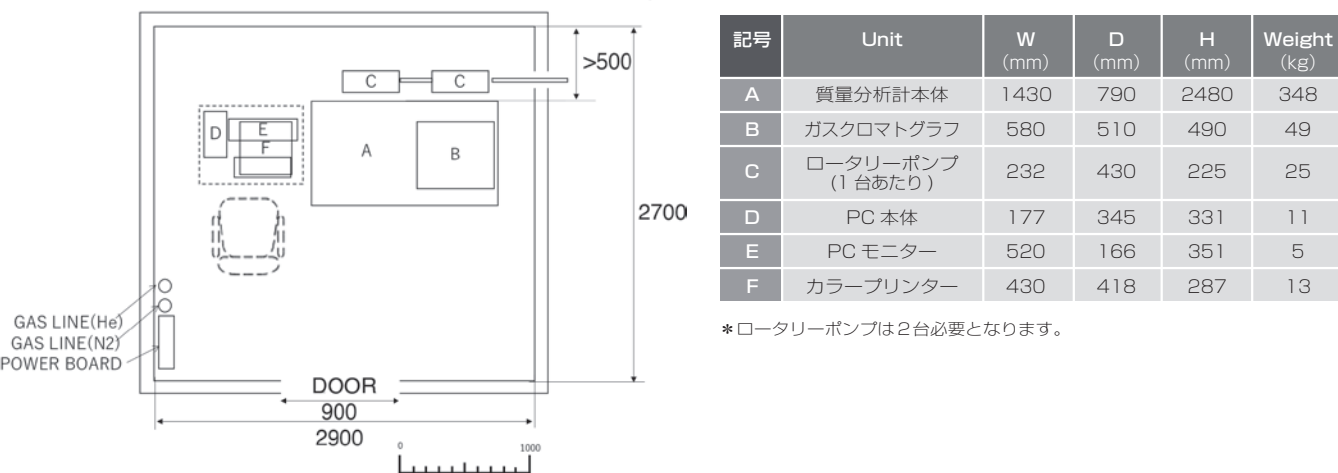
| 標準構成 | | 主要オプション |
|-----------|--|-----------------|
| イオン源 | 電子イオン化 | EI/FI/FD 共用イオン源 |
| 分析部 | リフレクトロン飛行時間質量分析計 | EI/PI 共用イオン源 |
| 検出部 | デュアルマイクロチャンネルプレート | CI イオン源 |
| データ収集システム | 連続アベレジャー | FD/FI イオン源 |
| ガスクロマトグラフ | Agilent 8890 | DIP |
| データシステム | パーソナルコンピューター、モニター、カラープリンター、 Windows® オペレーティングシステム、 メインプログラム (msAxel)、 自動データ解析プログラム (msFineAnalysis) | DEP |

設置条件

| 電源 | | 設置室 |
|------------------|--|---|
| 本体 | 単相 200 V ± 10% 20 A | 環境磁場 交流磁場 1 × 10 ⁻⁶ T 以下 固定磁場 5 × 10 ⁻⁴ T 以下 |
| ガスクロマトグラフ | 単相 200 V ± 10% 20 A | 床振動 振幅 (p-p) 25 μm 以下 加速度 0.1 m/s ² 以下 |
| データシステム | 単相 100 V ± 10% 15 A | 室温 20 ~ 27 °C |
| 設置端子 | D 種 (100 Ω 以下) | 温度変化 ± 3 °C /h 以内 |
| ガス | | 湿度 30 ~ 70% (結露しないこと) |
| 窒素ガス | | 最大発熱量 25,776 kJ/h |
| イオン源・分析部パージ用 | 0.5 ~ 0.6 MPa、純度 97%以上 | (本体、ガスクロマトグラフ、データシステムにおける 最大消費電力から算出した値) |
| バルブ駆動用 | | 排気設備 ロータリーポンプ (RP) の排気設備が必要です。 |
| ヘリウムガス | | |
| ガスクロマトグラフキャリアガス用 | 0.5 ~ 0.68 MPa、純度 99.999%以上 炭化水素含有量 0.5ppm 以下 | |

* 設置条件の詳細についてはお問い合わせください。

標準設置例



* ロータリーポンプは2台必要となります。

<注意>

- ロータリーポンプのメンテナンススペースを確保するため、壁から本体背面までの距離は 500 mm 必要です。
- ロータリーポンプの排気用に屋外排出の穴または配管が必要です。
- PC およびプリンター用テーブルについては、お客様の方で用意ください。
- 使用供給ガスの 1 次側まではお客様の方で用意下さい。

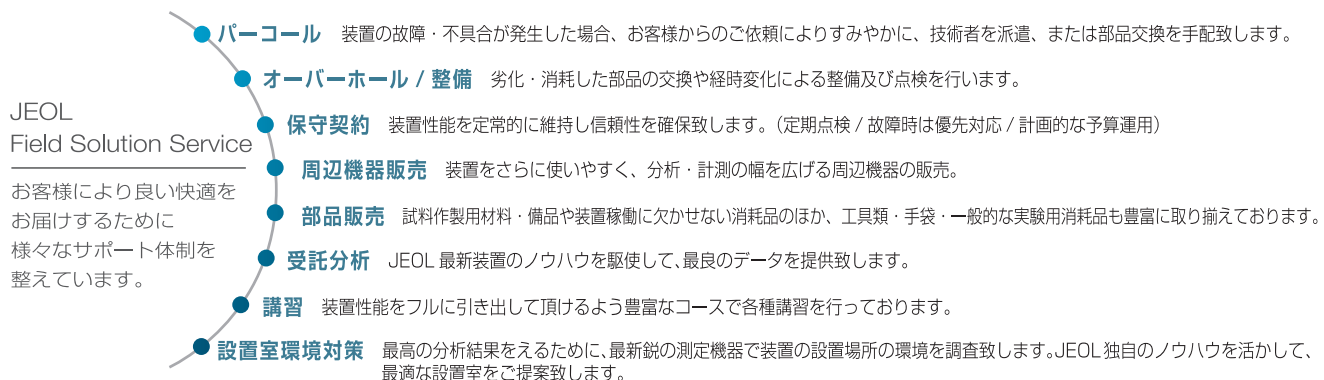
Windows は米国 Microsoft Corporation の米国およびその他の国における登録商標または商標です。

サービス&ソリューションのご案内

JEOL が誇る強力なサービス体制 お客様の良きパートナーを目指します・・・それが私たちの原点です

私たちのサービスは、お客様の装置を常に最良な状態に維持すること。

いつでも安心してお使いいただけるように装置をきめ細かくサポート致します。 私たちにできることを常に実践致します。



日本電子では、お客様に安心して製品をお使い頂くために、『総合コールセンター』を開設しております。

詳しくは HP へ



故障に関することや、部品・消耗品のご購入の際は下記までご連絡ください。

総合コールセンター TEL: 0120-134-788 (フリーダイヤル) FAX: 0120-734-788 (フリーダイヤル)

受付時間 月曜日～金曜日 8:30～19:00 (祝祭日は除く) 受付時間外の連絡は FAX または「Web サポート」にて受け付けております。www.jeol.co.jp

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ください。



本社・昭島製作所

〒196-8558 東京都昭島市武蔵野3-1-2 TEL: (042) 543-1111(大代表) FAX: (042) 546-3353
www.jeol.co.jp ISO 9001・ISO 14001 認証取得

東京事務所 〒100-0004 東京都千代田区大手町2丁目1番1号 大手町野村ビル

業務統括センター TEL: 03-6262-3564 FAX: 03-6262-3589

デマンド推進本部 TEL: 03-6262-3560 FAX: 03-6262-3577

SI営業本部 SI販売室 TEL: 03-6262-3567 FAX: 03-6262-3577

セミコンダクタ・ソリューションセールス部 TEL: 03-6262-3567 ソリューション推進室 TEL: 03-6262-3566

産業機器営業部 TEL: 03-6262-3570 MEソリューション販売室 TEL: 03-6262-3571

SE事業戦略部 SE営業グループ TEL: 042-542-2383 (本社・昭島製作所)

東京支店 〒100-0004 東京都千代田区大手町2丁目1番1号 大手町野村ビル TEL: 03-6262-3580(代表) FAX: 03-6262-3588

東京 SI1グループ TEL: 03-6262-3581 東京 SI2グループ TEL: 03-6262-5586

ME営業グループ TEL: 03-6262-3583

東京第二事務所 〒190-0012 東京都立川市堀町2丁目8番3号

ソリューションビジネス部 TEL: 042-526-5098 FAX: 042-526-5099

横浜事務所 〒222-0033

神奈川県横浜市港北区新横浜3丁目6番4号 新横浜千歳観光ビル6階

札幌支店 〒060-0809 北海道札幌市北区北9条西3丁目19番地 ノルテプラザ5階

仙台支店 〒980-0021 宮城県仙台市青葉区中央2丁目2番1号 仙台三菱ビル6階

筑波支店 〒305-0033 茨城県つくば市東新井18番1

名古屋支店 〒450-0001 愛知県名古屋市中村区郡古野1丁目47番1号 名古屋国際センタービル14階

大阪支店 〒532-0011 大阪府大阪市淀川区西中島5丁目14番5号 ニッセイ新大阪南口ビル11階

西日本ソリューションセンター

〒532-0011 大阪府大阪市淀川区西中島5丁目14番5号 ニッセイ新大阪南口ビル1階

広島支店 〒730-0015 広島県広島市中区橋本町10番6号 広島 NSビル5階

高松支店 〒760-0023 香川県高松市寿町1-1-12 パシフィックシティ高松5階

福岡支店 〒812-0011 福岡県福岡市博多区博多駅前2丁目1番1号 福岡朝日ビル5階

海外事業所・営業所 Boston, Paris, London, Amsterdam, Stockholm, Sydney, Milan, Singapore, Munich, Beijing, Moscow, Sao Paulo (ほか)

No.2301B143C(Bn)