

令和4年 質量分析講習会4 ESI-MS ハイブリッド講習会

2021年 8月
日本ウォーターズ株式会社
マーケティング本部
窪田雅之

今日、解説させていただく質量分析装置

<ハードウェア>

Xevo G2-XS QToF 四重極飛行時間型質量分析計

<ソフトウェア>

MassLynx (装置制御、測定)

UNIFI 科学情報システム



MassLynx™

UNIFI®
SCIENTIFIC INFORMATION SYSTEM

Xevo G2-XS QToF 基本性能

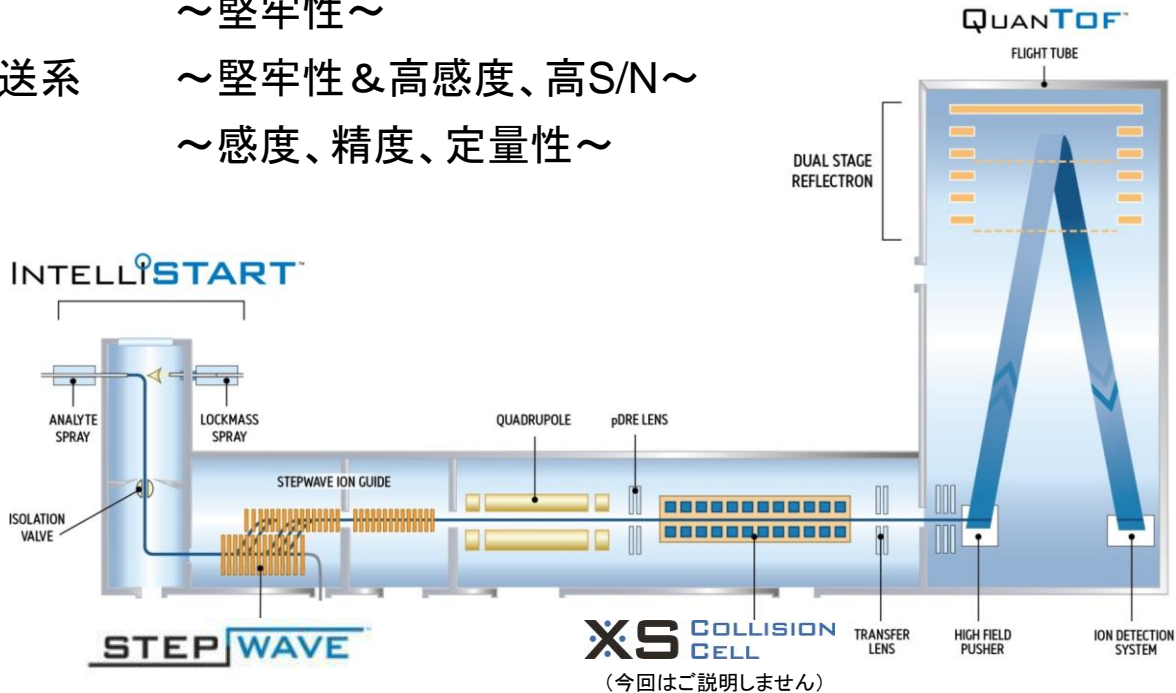
- イオン化 ESI, APCI (オプション : DESI, ASAP, APGC)
- 質量レンジ m/z 20 – 16,000 (標準)
- 質量精度 1ppm RMS (内標準使用時)
- 分解能 40,000 FWHM@ m/z 956
- 分析モード MS、MS/MS、MS^E

名称

- Z-Spray イオン源
- StepWave イオン移送系
- QuanTof アナライザ

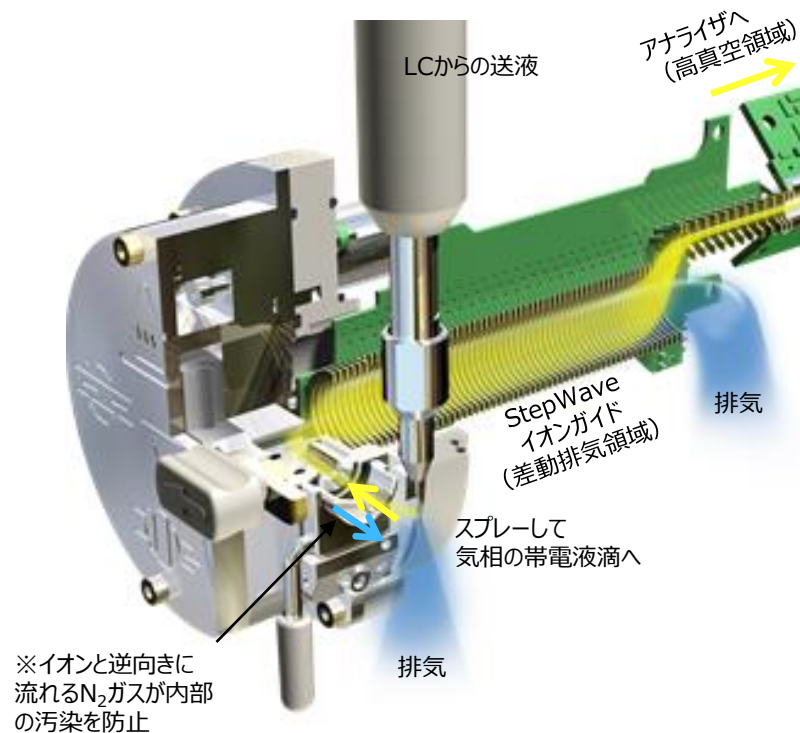
効能

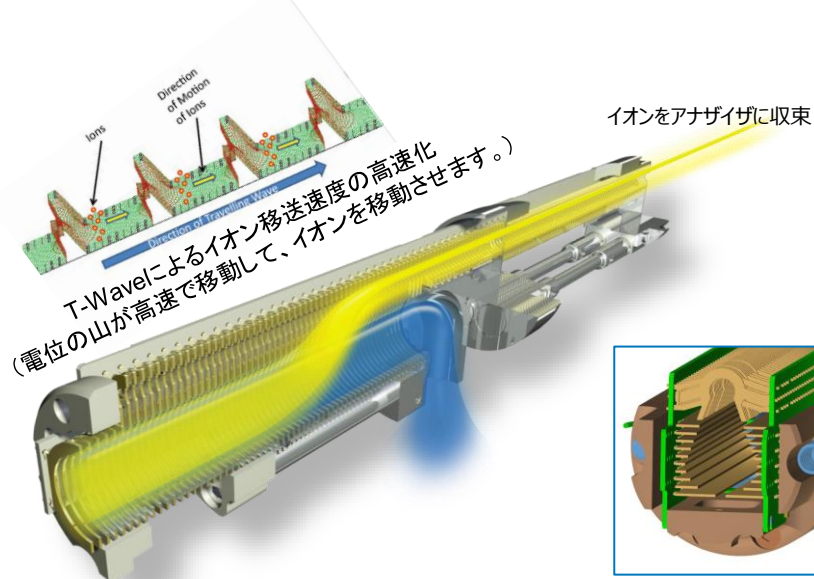
- ～堅牢性～
- ～堅牢性 & 高感度、高S/N～
- ～感度、精度、定量性～



Zスプレーによる堅牢性確保、高感度化

- 長期安定稼働のために、汚染物質をアナライザ部分に取り込まないようにする設計
 - キャピラリーを通して上部からスプレーされた目的物質は、2回、直角に曲げられて真空内部に移送される。汚染要因となる大きな帯電液滴はこの段階で排除される。
 - スプレーの取り込み口（小さな穴）は対向ガス流に保護されており、汚染を排除
 - 段階的に真空度を高める差動排気領域には StepWaveイオンガイドを使用（次項）





パフォーマンスを犠牲にせず、最大の堅牢性を実現するStepWave

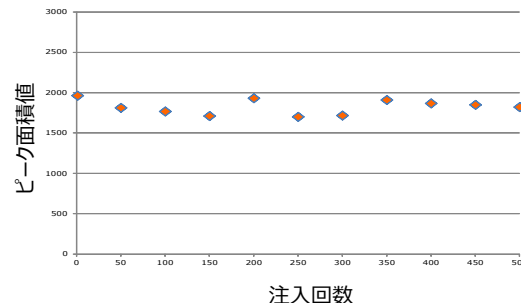
- 高感度化のためのイオンの高効率捕捉
- ノイズ低減、堅牢性向上のための大気分子の高効率排気
- アナライザの性能を高めるためのイオンの高収束効果
- T-Wave（イオン移送用の電圧）によるイオン移送の高速化

この部分は、大気圧下のイオン源と、高い真空度を保つアナライザの間に位置する差動排気領域で、この領域を高効率でイオンを通過させるためにはイオンガイドが必要です。真空度の変化が激しい部分であり、流体力学と電磁気学の両方が関与するため、設計が難しい部分です。

イオン源側は真空度が低く、流体力学の作用が優勢で、真空度の変化による拡散が顕著であり、StepWaveデバイスは大きな穴の開いた積層型レンズで拡散していくイオンを捕捉しています。アナライザに近づくにつれて、真空度は高くなり、電磁気学的作用が優勢になります。アナライザはイオンビームが収束している（細くなっている）ほど性能が高くなるので、小さい穴の積層型レンズにする必要があります。

StepWaveはこの大小の穴のレンズを組み合わせたデバイスで、デバイスの途中で軌道をずらすことで、イオンの捕捉と収束、堅牢性の低下やノイズの要因となる大気分子の排気を高効率で実現しています。

空気の流れに乗って取り込まれたイオンの移動速度は質量分析計の動作には十分ではないので、積層型レンズにはイオンの移動を促す電位が印加され、イオンは強制的に、高速でアナライザに移送されます。



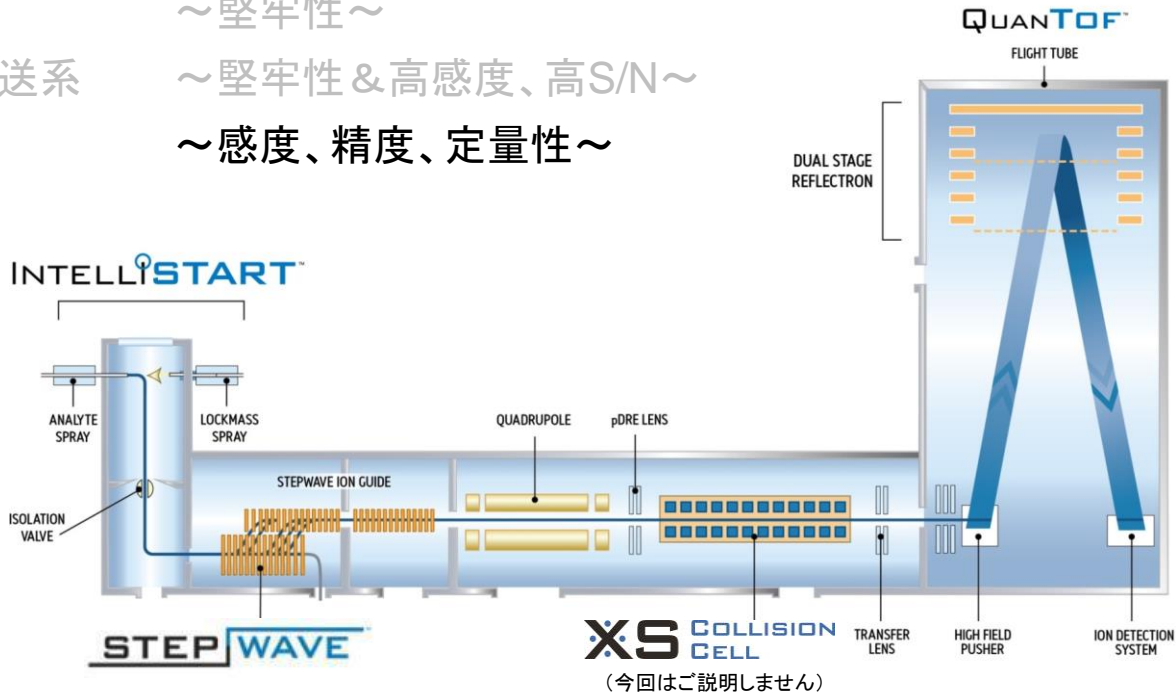
Verapamil in Plasma
30時間、500回の繰り返し測定
Peak Area %RSD = 5%

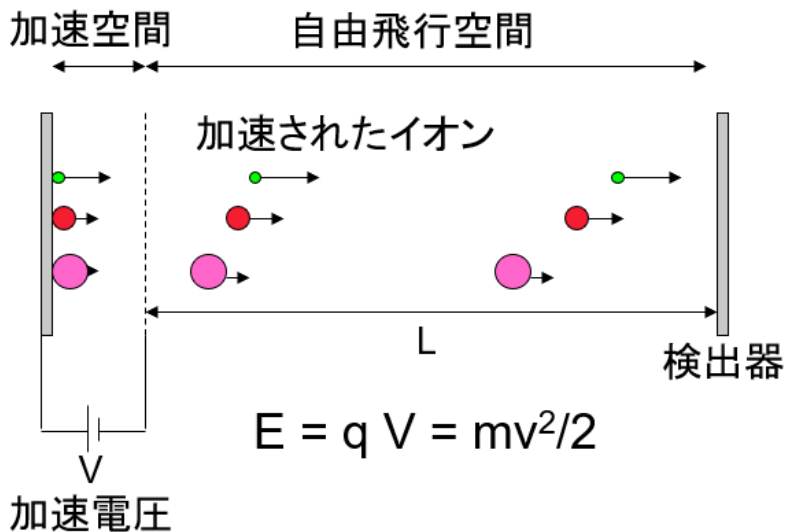
名称

- Z-Spray イオン源
- StepWave イオン移送系
- QuanTof アナライザ

効能

- ～堅牢性～
- ～堅牢性 & 高感度、高S/N～
- ～感度、精度、定量性～





イオンを一定の電圧 (V) で加速したときのエネルギー、質量と速度の関係は

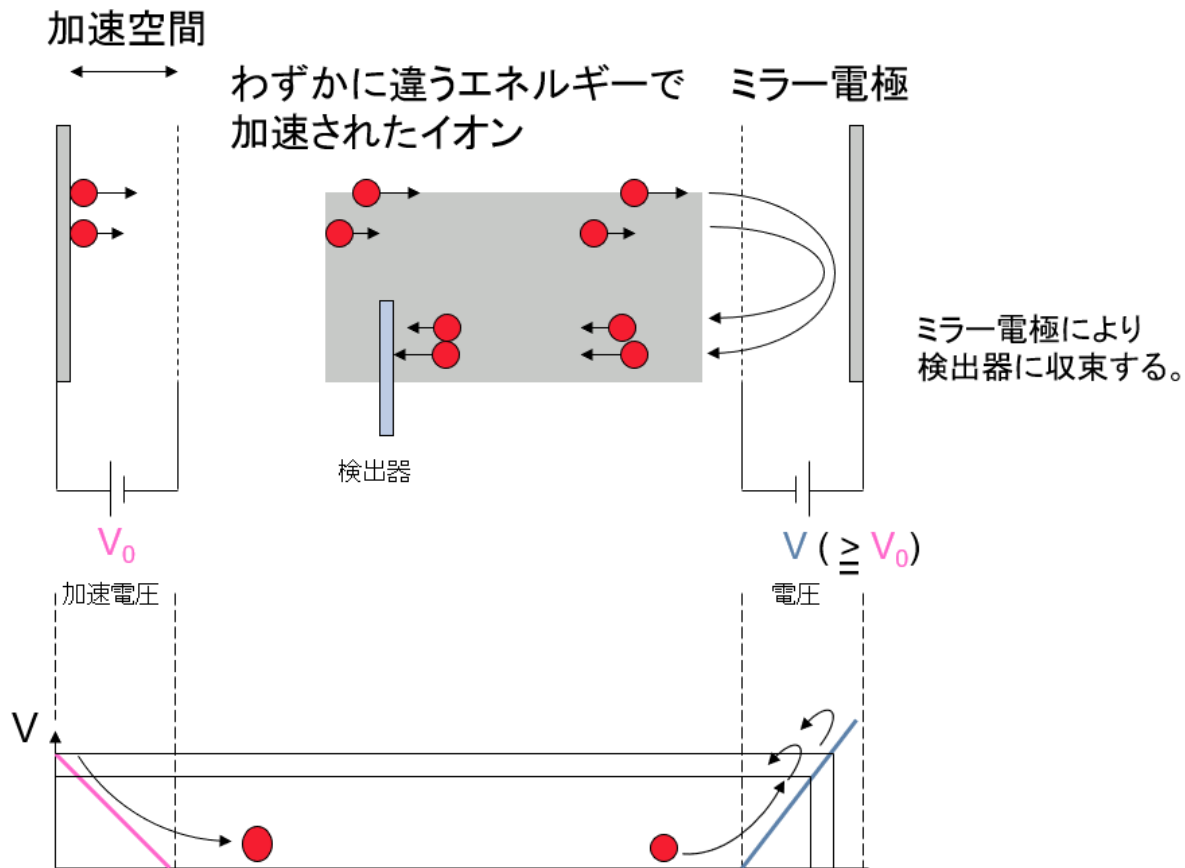
$$E = qV = mv^2/2 \quad (\text{エネルギー保存則})$$

$$v = \sqrt{2qV/m}$$

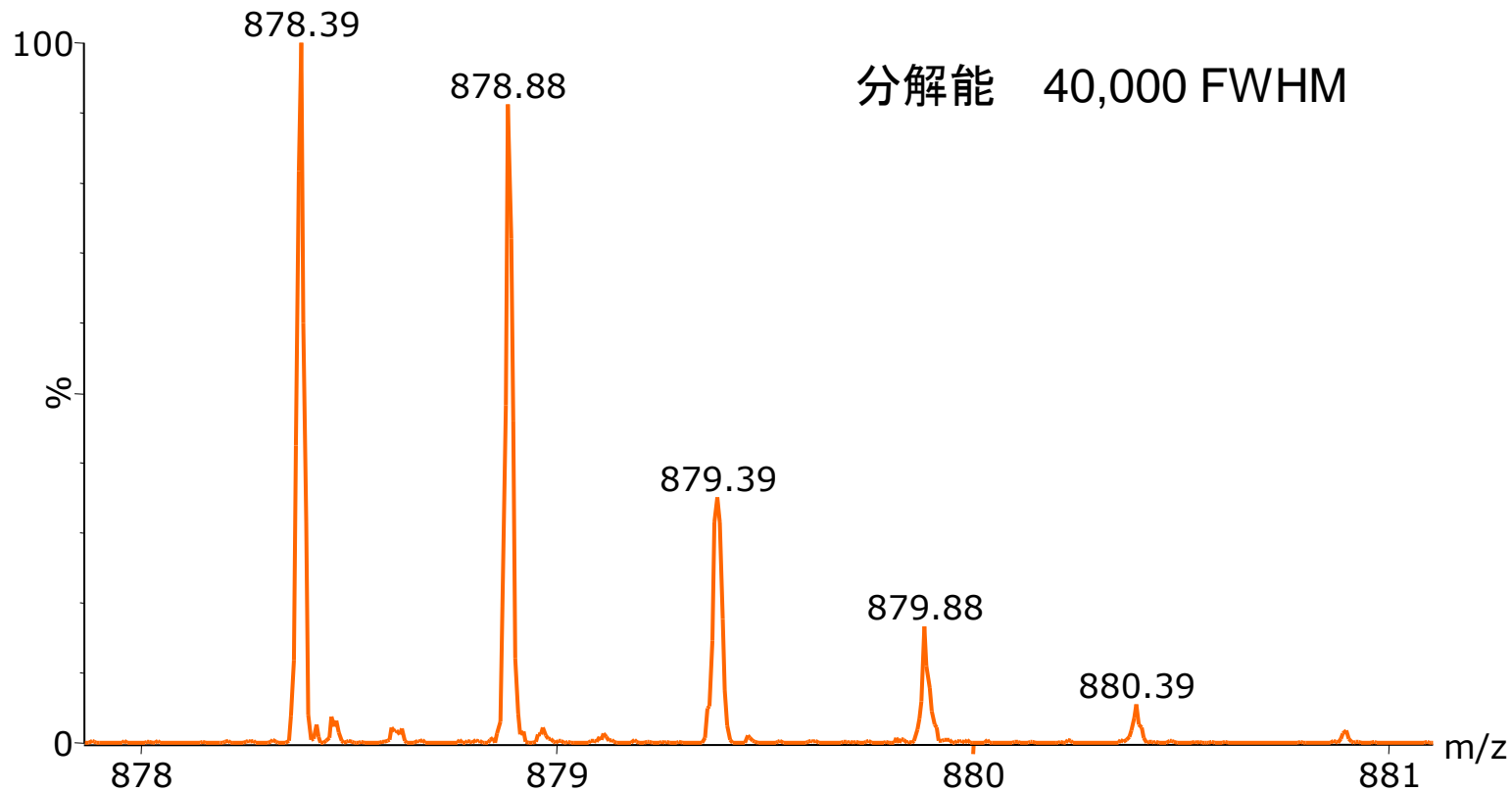
$$\therefore T = L / v = \frac{L}{\sqrt{m/2qV}}$$

(E : 運動エネルギー、 V : 電圧、 m : 質量、 v : イオンの速度)

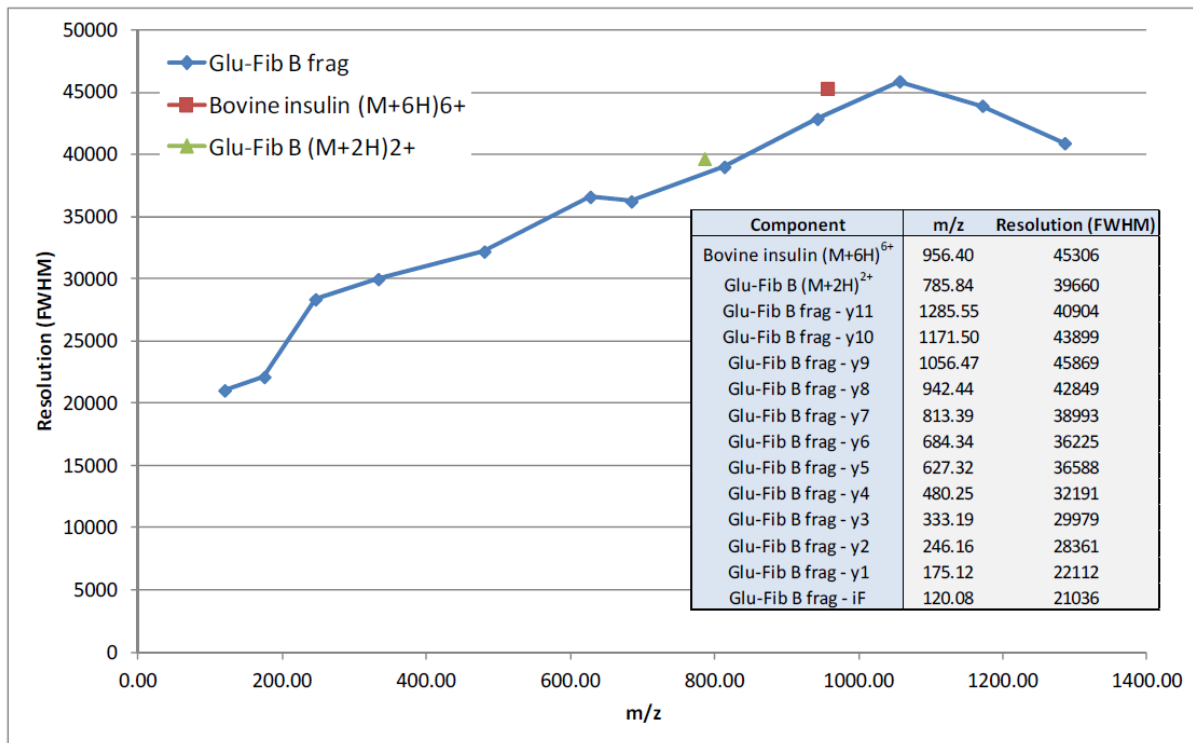
リフレクター（ミラー電極）の基礎



TOFは高い分解能が特長

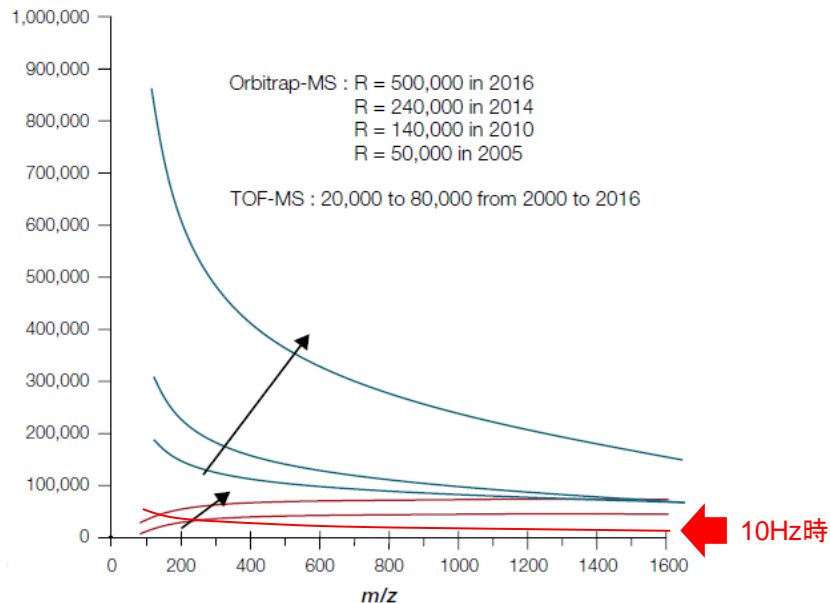
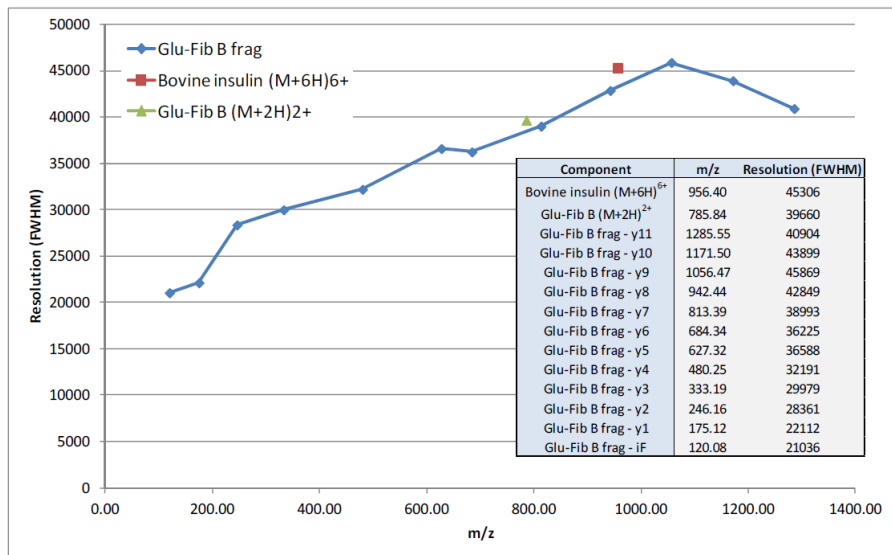


分解能性能：m/zと分解能の関係



飛行時間型はm/zが大きくなるほど、分解能が高くなります。これは、フライト時間が長くなり、分離がよくなるため、です。

Xevo G2-XS QToF と 電場型フーリエ変換MS との分解能比較



LC-MSで最低限必要な10Hz程度のスキャンレートを維持しようとする、電場型フーリエ変換MSの分解能はToFよりも低くなります。

インフュージョン分析などでは、スキャンレートを気にしなくてもよいので、高い分解能設定で使用できます。

このグラフは、以下のサイトから引用。
<https://analyteguru.com/making-characterizing-unknowns-as-easy-as-targeted-quantitation-with-orbitrap-technologies/>

定量性（ダイナミックレンジ）を大幅に改善したQuanTof 技術

QUANTOF™

直線性、スピード、真度



20年前、ADコンバータの性能の限界から定量性に乏しい、と言われていましたが、当時から半導体技術の進歩で性能が向上する、と言われていました。

課題となっていたのは、

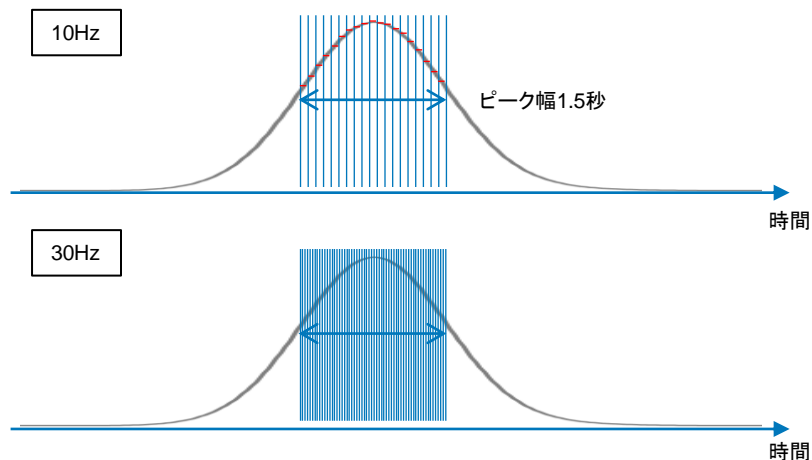
- 幅広い直線性
- 高い分解能
- 測定速度

です

QuanTof 技術は、最新の半導体技術でこれらの課題を解決しています。

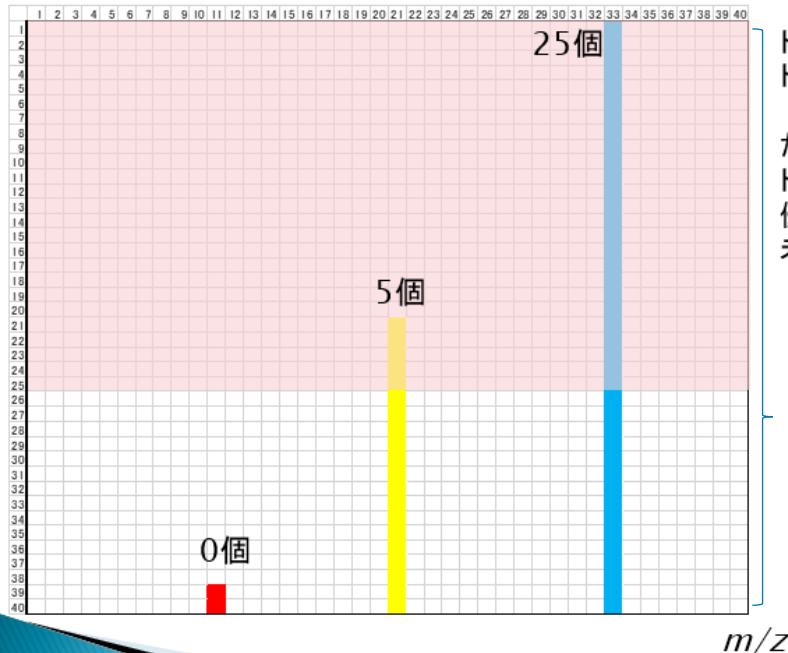
TOFに定量性を持たせるQuanTof 技術

- 1秒間に30,000スペクトルを記録する高速測定して積算処理
- 8bit A/Dコンバータ
 - 30Hz取り込み（1,000スペクトル積算）の場合
ADコンバータ性能 8bit (256階調) x 1,000 = 2.56×10^5 のダイナミックレンジ
 - 1,000スペクトルの積算により、m/z、信号強度の値は統計的に収束し、高い再現性、定量性を示す（積算数は可変です。）
 - UPLCのシャープなピークに追従できる取り込み速度でピークトップを正確にとらえ、定量性が向上



スペクトル内ダイナミックレンジ

30個のイオンをトラップできるとした場合



トラップデバイスには必ず
トラップできる容量が決まっています。

たとえば、30個のイオンの場合、
トラップ内には量の多いものが
優先的にトラップさせ、微量な成分は
未検出になります。

流入するサンプルを時間で分割して装置に入れるのはTOFも同じ。

TOFは256階調しかない。

「未検出」でも、何度かに1回は
検出されるかも。

1000枚のスペクトルを積算

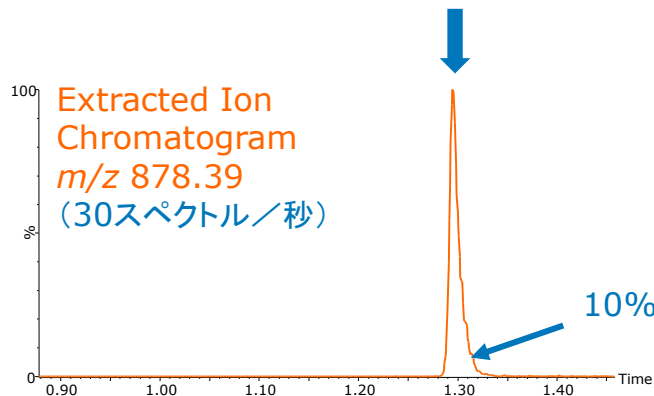
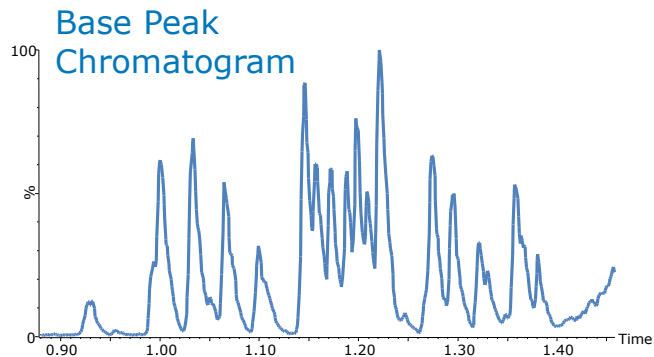
G2-XSは256階調

TOFのIon injection timeは数 μ s。
あるフーリエ変換型MSでは16、384階調。
Ion Injection timeは数ms。

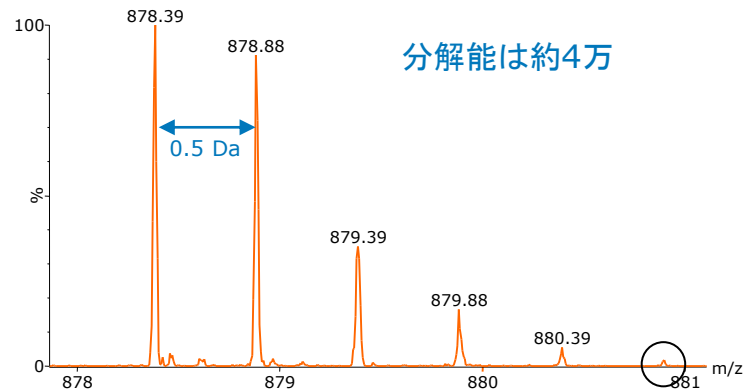
2017年 第65回質量分析総合討論会
ワークショップ 1B-W1-1700より

分解能性能と微量信号の検出

タンパク質酵素消化物のLC-MS

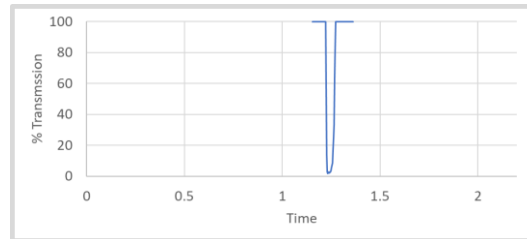
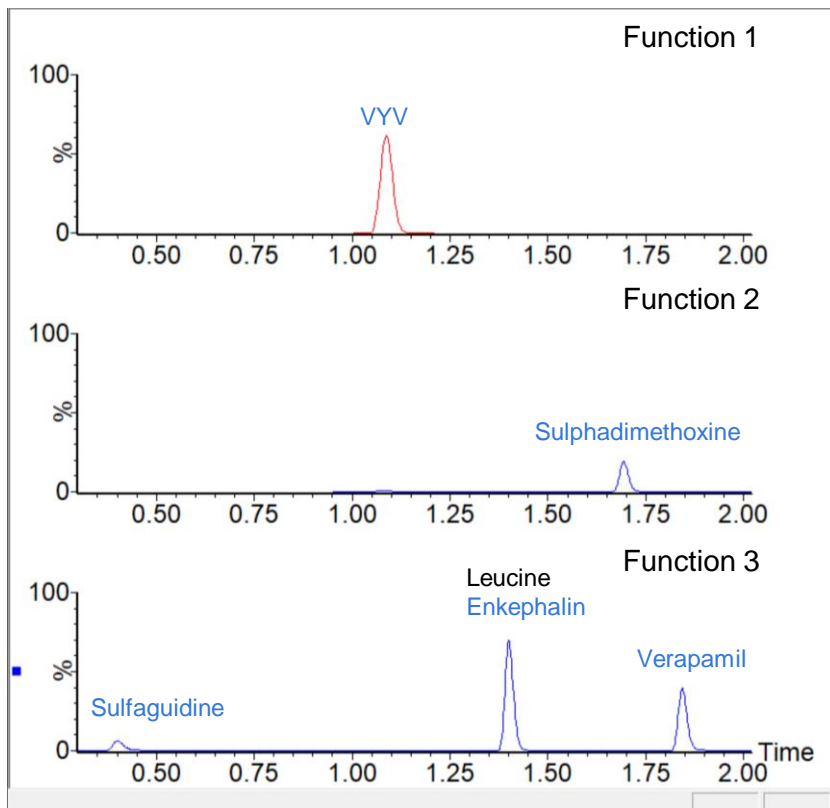


ピークトップの1スキャンのマススペクトル(2価イオン)

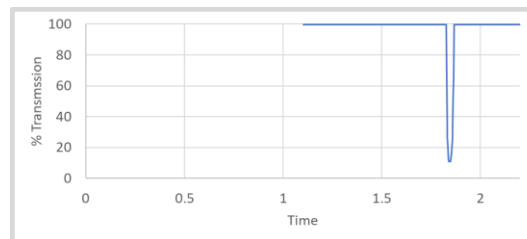


1スキャンは1000回の積算データであり、同位体ピークの強度が、低い比率のものまで正確に観測されています。同位体強度は、組成解析の際に重要な要素となります。

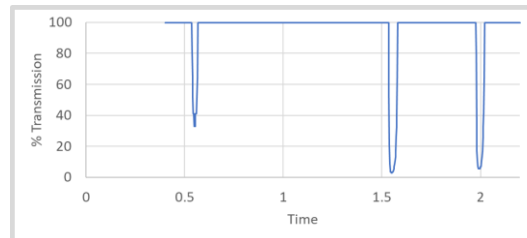
定量レンジを拡大するためのToF MRM モード



Transmission vs Time F1



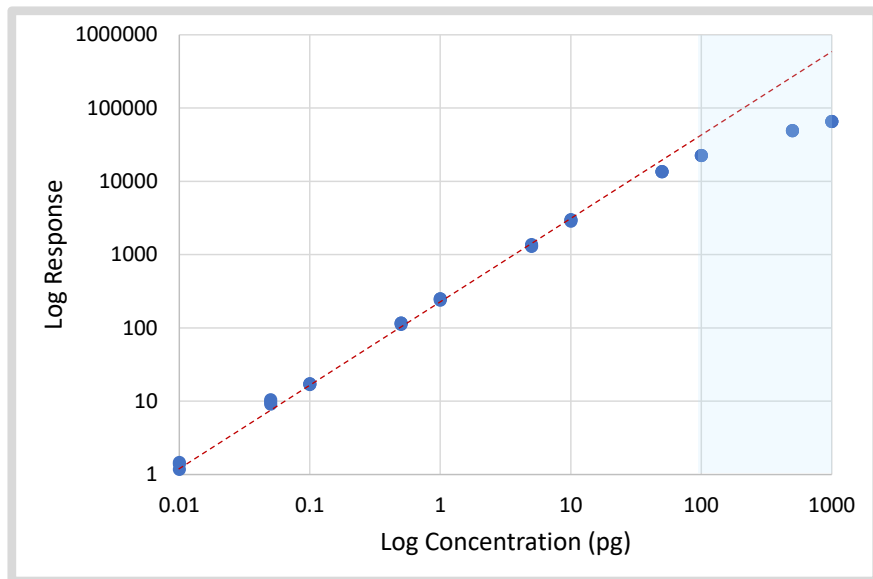
Transmission vs Time F2



Transmission vs Time F3

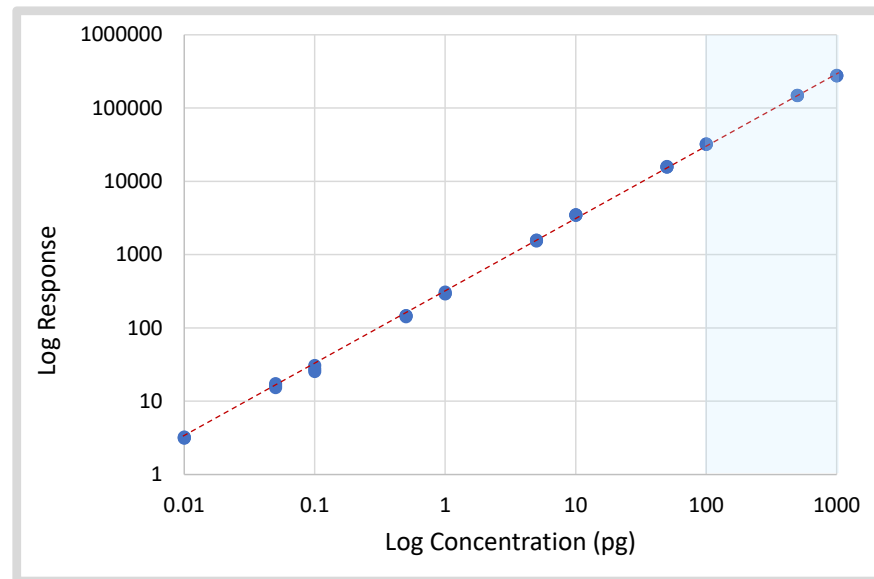
Val-Tyr-Val (m/z 380.2>136.1)

Without AIC



~ 4 Orders LDR

With AIC



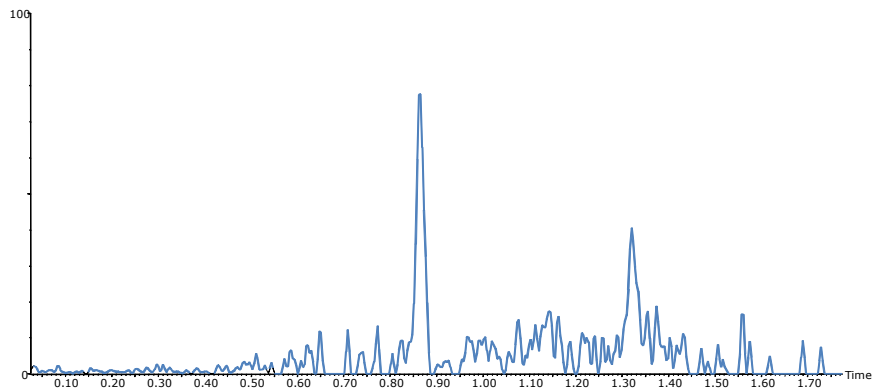
~ 5 Orders LDR

感度：ブスピロンの分析感度

Buspirone 50fg on column

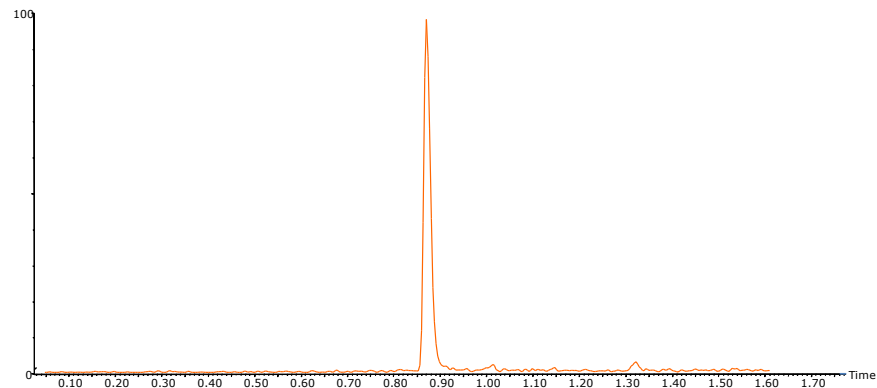
MS Mode S:N (RMS) 80:1

Full Scan MSで386.2556±30ppmのマスキングマスク



Tof-MRM Mode S:N (RMS) 1148:1

m/z 386.2556 > 122.0718



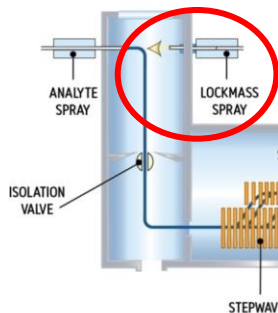
精密質量分析

内標準物質を自動的に導入し、リアルタイム補正

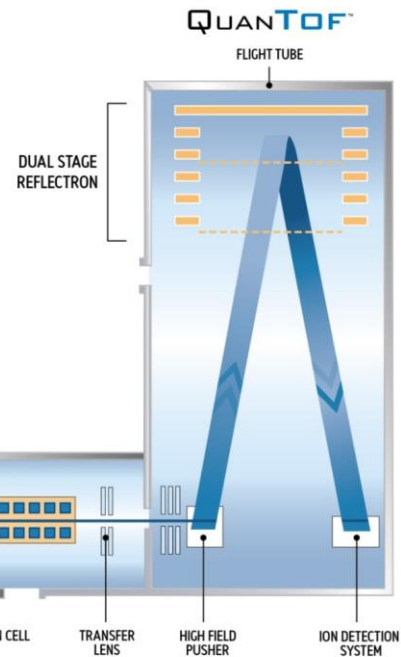


- 内標準物質を装置に内蔵

INTELLISTART™

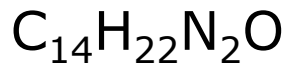
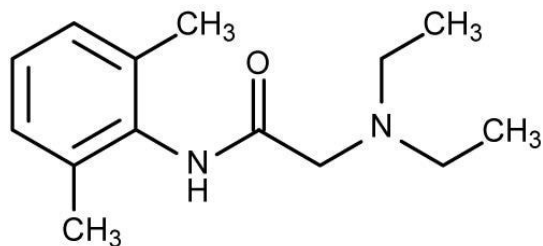


- 内標準物質専用のイオン化プローブを内蔵



質量精度：リドカインの精密質量分析

Lidocaine



Replicate	Observed m/z	Error (ppm)
1	235.1811	0.4
50	235.1812	0.9
100	235.1812	0.9
150	235.1812	0.9
200	235.1810	0.0
250	235.1811	0.4
300	235.1811	0.4
350	235.1812	0.9
400	235.1810	0.0
450	235.1810	0.0
500	235.1811	0.4

500回繰返し分析(30時間)時
確度: 1 ppm RMS以内

精密質量分析による組成解析

Single Mass Analysis

Tolerance = 1.0 mDa / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Element prediction: Off

Number of isotope peaks used for i-FIT = 4

Monoisotopic Mass, Even Electron Ions

473 formula(e) evaluated with 2 results within limits (up to 3 best isotopic matches for each mass)

Elements Used:

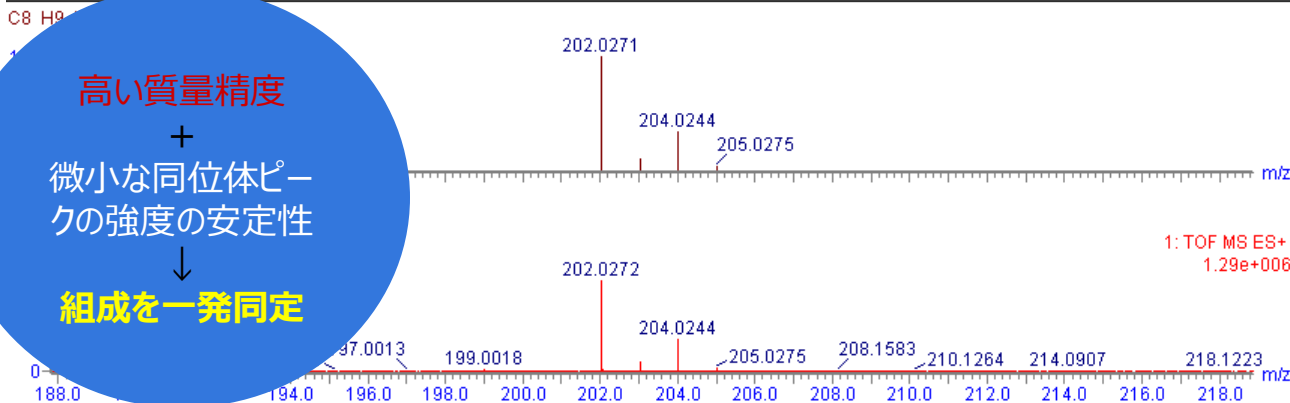
C: 0-50 H: 0-100 N: 0-10 O: 0-30 Cl: 0-5

Mass	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Formula	i-FIT	i-FIT Norm	Fit Conf %	C	H	N	O	Cl
202.0272	202.0271	0.1	0.5	4.5	C8 H9 N O3 Cl	2055.2	0.000	100.00	8	9	1	3	1
	202.0262	1.0	4.9	0.5	C8 H10 N5 O Cl2	2077.2	21.987	0.00	3	10	5	1	2

i-Fit機能による組成候補の絞り込み

- ① 分子関連イオンの精密質量精度
- ② 安定同位体強度比
- ③ 安定同位体精密質量

高い質量精度
+
微小な同位体ピーク
の強度の安定性
↓
組成を一発同定



さまざまな情報を組み合わせた解析

waters_connect プラットフォームのUNIFI app で解析する

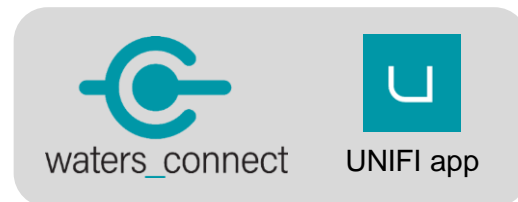
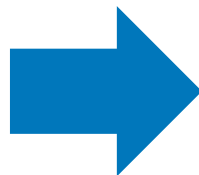


Xevo G2-XS QToF

- ✓ 高分解能MSスペクトル
- ✓ **MS^E**によるフラグメントイオン情報

MS^E

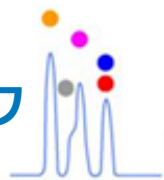
薬毒物スクリーニング分析では、分析対象のデータベースがあることから、網羅的な検出能力を重視してMS^E(DIA)分析を行います。この点では、QToFとRDaの性能は同じです。



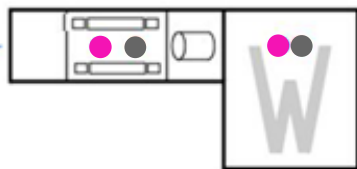
- ✓ 組成解析
- ✓ スペクトルライブラリー検索
 - ✓ 既存ライブラリー
 - ✓ Watersのライブラリー
 - ✓ Wileyなどの商用データベース
 - ✓ インハウスライブラリーを作成、検索可能
- ✓ 化合物データベース検索
 - ✓ ChemSpiderやインハウスデータベース
 - ✓ 構造式からフラグメントイオンをシミュレーション
 - ✓ 実測スペクトルとの比較

網羅性を重視するMS^E測定 of 仕組み

クロマトグラフ



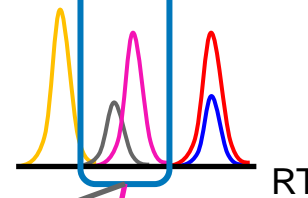
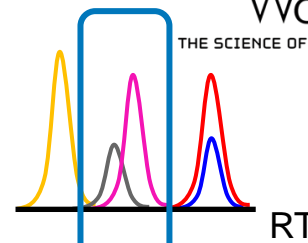
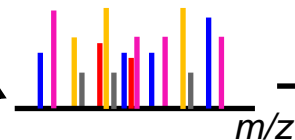
すべての分子量関連イオンおよび
フラグメントイオンを記録する



低エネルギー



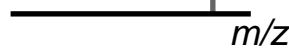
高エネルギー



保持時間が同じイオンのみを集めて
スペクトルを再構築する

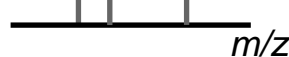
低エネルギー

(分子量情報)



高エネルギー

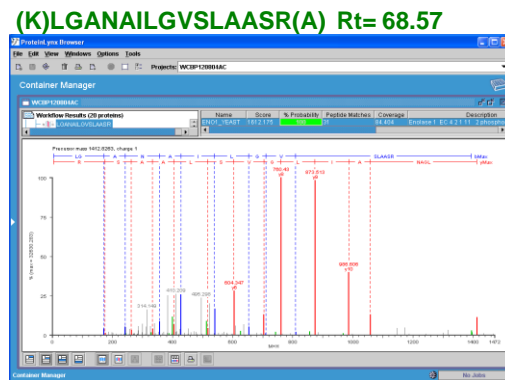
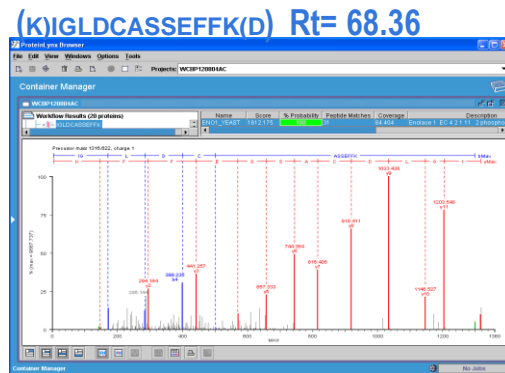
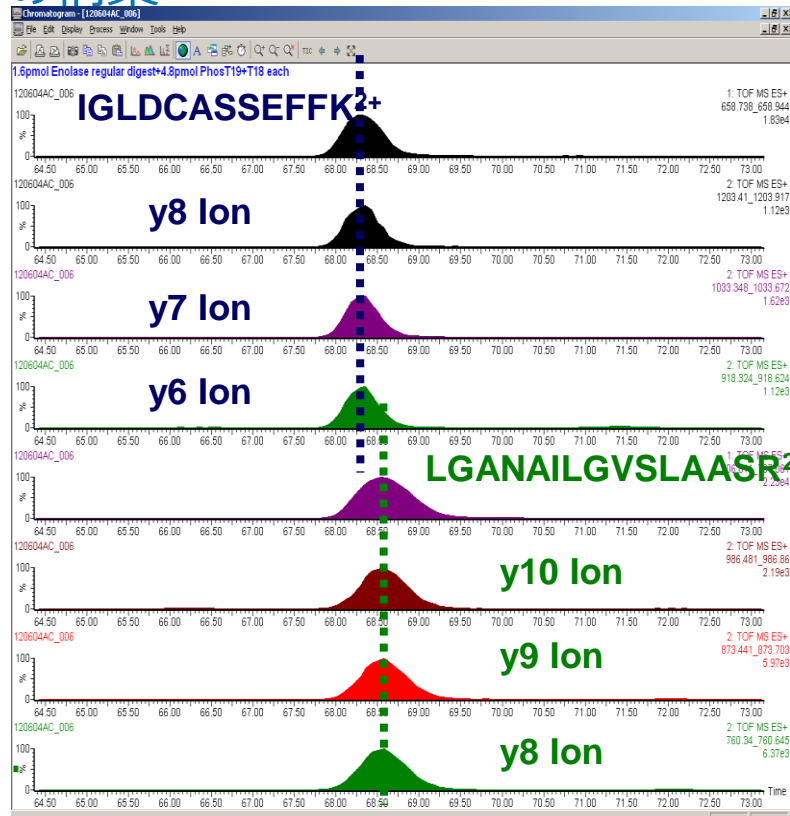
(フラグメントイオンの情報)



ピークが未分離であっても（例：ピンクとグレー）、
ピークトップが異なれば、RTによるAlignment（ど
の分子量関連イオンに由来するフラグメントイオンな
のかの識別）が可能です。

(次スライド)

保持時間によるプリカーサーイオンとフラグメントイオンの関連付けとスペクトルの構築



2つのペプチドのピークの頂点の時間とピークプロファイルは異なっているので、フラグメントイオンスペクトルを別個に構築できる

UNIFI App 基本的な解析の流れ

すべての
ピークの
3Dピッキング

各ピークの
情報を統合

データベース、
ライブラリーの
自動検索

構造推定

インハウス
ライブラリー
の構築

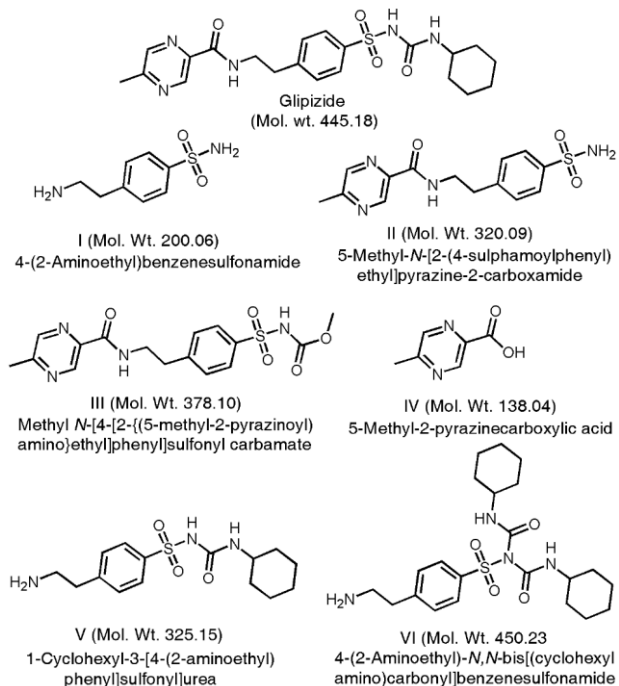
UNIFI

データベースやライブラリーの検索、構築を前提に、
分析データから情報を抽出、検索を行うアプリ。

構造式からフラグメントイオンを予測する機能で、
構造推定から構造確認、ライブラリー拡充を行う。

解析結果をライブラリーに登録することで、今後の
解析に応用が可能。

UNIFIサイエンスライブラリー 既知化合物の登録



Glipizide Import - Microsoft Excel

	A	B	C
1	Name	Formula	Structure Filename
2	Impurity I		Impurity I.mol
3	Impurity II		Impurity II.mol
4	Impurity III		Impurity III.mol
5	Impurity IV		Impurity IV.mol
6	Impurity V		Impurity V.mol
7	Impurity VI		Impurity VI.mol
8	Impurity VI precursor		Impurity VI precursor.mol
9			
10			

Excelファイルおよびmolファイルから一括でインポート

UNIFIサイエンスライブラリー 既知化合物の登録

Scientific Library
Home > Manage Library Items > Library Item Editor

Results
Search results (5 items found)

- 1 Glipizide
- 2 Impurity II
- 3 Impurity III
- 4 Impurity IV
- 5 Impurity V

Glipizide [Forced Degradation]

Property	Value
Item type	Compound
Item description	Oral rapid- and short-acting anti-diabetic drug, second generation sulfonylurea
IUPAC name	N-(2-{4-[(Cyclohexylcarbonyl)sulfamoyl]phenyl}ethyl)-5-methyl-2-pyrazinecarboxamide
Formula	C21H27NSO4S
Hill formula	C21H27NSO4S
Average molar mass	445.5352
Monoisotopic mass	445.1784
Item tag	
InChI	15/(C21H27NSO4S/c1-15-13-24-19(14-23-18)20(27)22-12-11-16-7-9-18(10-8-19)31(28)30(26-21)(28)25-17-5-3-2-4-6-17)/h7-10,13-14,17H2-6,11-12H2,1H3,(H4,22,27)(H2,25,26,28)

Properties

Property	Value
LogD	0.05
LogP	1.9
pKa	5.08

Synonyms

Synonym	Synonym
Actine	
Diactin	
Dibizide	
Gilibe	
Gilbeten	
Glimerol	
Glip	
Glucotrol	

Identifiers

Identifier	Value
ChEBI	5384
ChemSpider	3359
ChemSpider	29094-61-9
Drug Bank	DB01067
EINECS	249-427-6
PubChem CID	3478

molファイルから構造式が登録される

化学的特性、pKa、MSDS、SOPs、HTML、audit trailなども登録可能

Properties

- Properties
- Spectra
- References
- Documents
- Retention time data
- Compare spectra
- Detection results
- Optimization results
- Audit trails

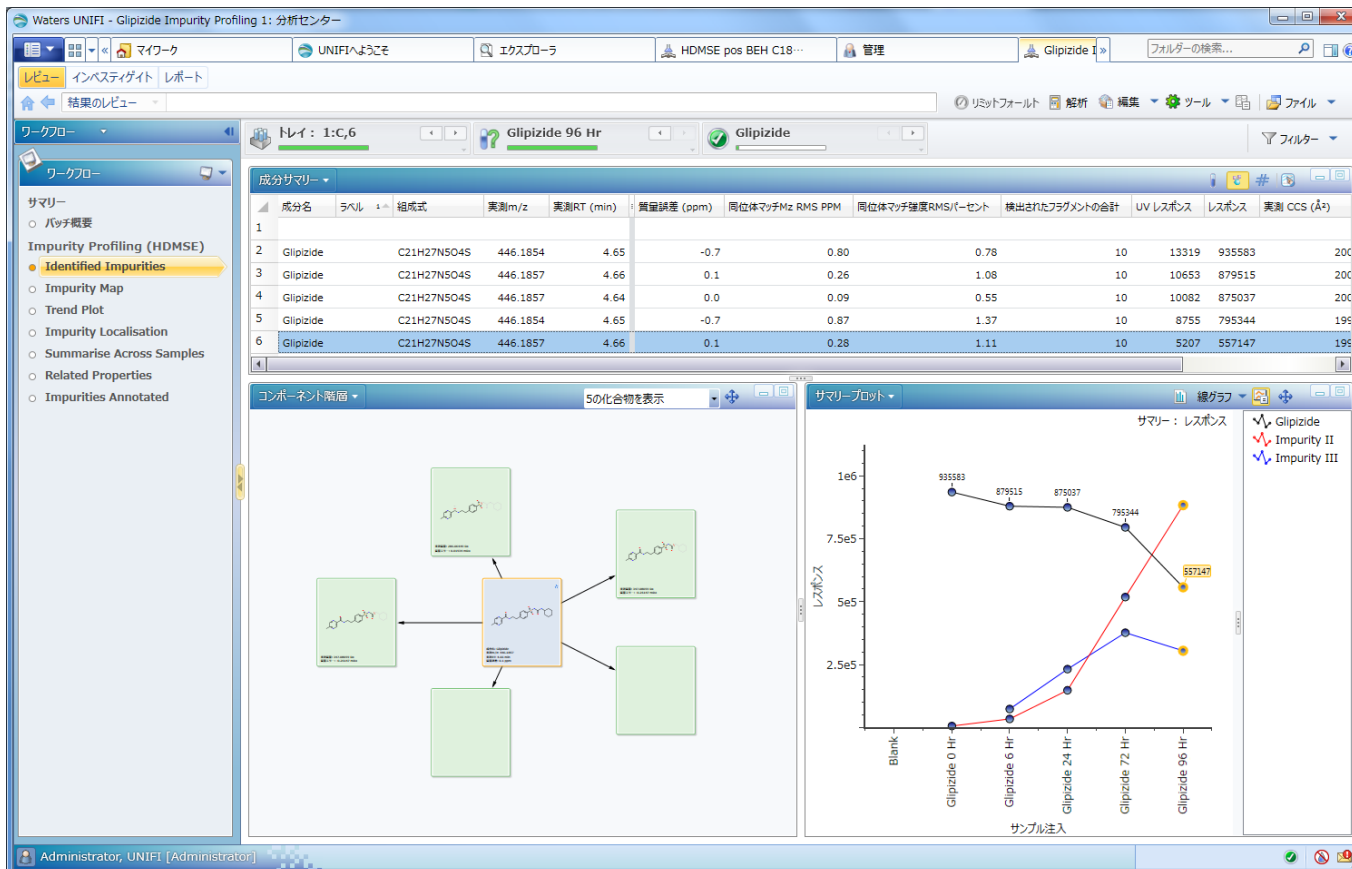
Audit trails

Action	Date	User	Full name	Computer name
1 Created item 'Glipizide' in library 'Forced Degradation'.	Aug 20, 2014 16:28:50 Eastern Da...	Mark Wrona	Wrona, Mark	MARKWRONA-PC
2 Modified item 'Glipizide' in library 'Forced Degradation'.	Aug 20, 2014 16:31:17 Eastern Da...	Mark Wrona	Wrona, Mark	MARKWRONA-PC

既知化合物ターゲットスクリーニング解析結果 検出された既知化合物

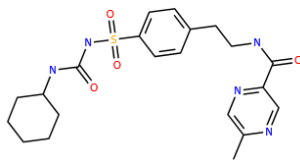


既知化合物ターゲットスクリーニング解析結果 検出された既知化合物



- **既知化合物のターゲットスクリーニング解析**
 - サイエンスライブラリーを用いた化合物のスクリーニング
 - 精密質量、RT、フラグメントイオン（およびCCS）を用いたスクリーニング
 - 既知化合物
- **自動予測ツールなどを用いた類縁化合物解析**
 - MetIDや不純物プロファイリングなど
 - 既知化合物の構造などから分解物や反応物などを含む類縁化合物を計算し予測
 - 精密質量、フラグメントイオンを用いてマッチング
 - 既知化合物に関連する情報を用いてピークを検索（フラグメントイオン、ニュートラルロス、ハロゲンの有無など）
- **類縁化合物以外の化合物の解析**
 - 元素組成計算
 - サイエンスライブラリー検索、オンライン化合物DB検索（Chemspider）
 - フラグメントイオン解析（理論的フラグメンテーション）
 - 上記解析を自動化したディスカバリーツール、ボタン一つで化合物同定
 - 同定した成分をそのままサイエンスライブラリーに登録可能（未知から既知へ）

自動予測ツールの設定



化合物構造の登録

Glyburide-C6H10(クラーベージ) -82.0783 Da. 代謝物数: 1 削除

Glyburide-C6H11N(クラーベージ) -97.0891 Da. 代謝物数: 1 削除

Glyburide-C7H11NO(クラーベージ) -125.0841 Da. 代謝物数: 16 削除

クラーベージツールを実行
 複素環のクラーベージを許可
最小質量カットオフ: Da

クラーベージツールにより分解物または脱アルキル体を予測

選択した反応

名前	質量差(Da)	組成式	分類子	結合されます
還元	2.0157	+H2	Phase I	<input type="checkbox"/>
酸化	15.9949	+O	Phase I	<input type="checkbox"/>
不飽和化	-2.0157	-H2	Phase I	<input type="checkbox"/>
メチル化	14.0157	+CH2	Phase II	<input type="checkbox"/>

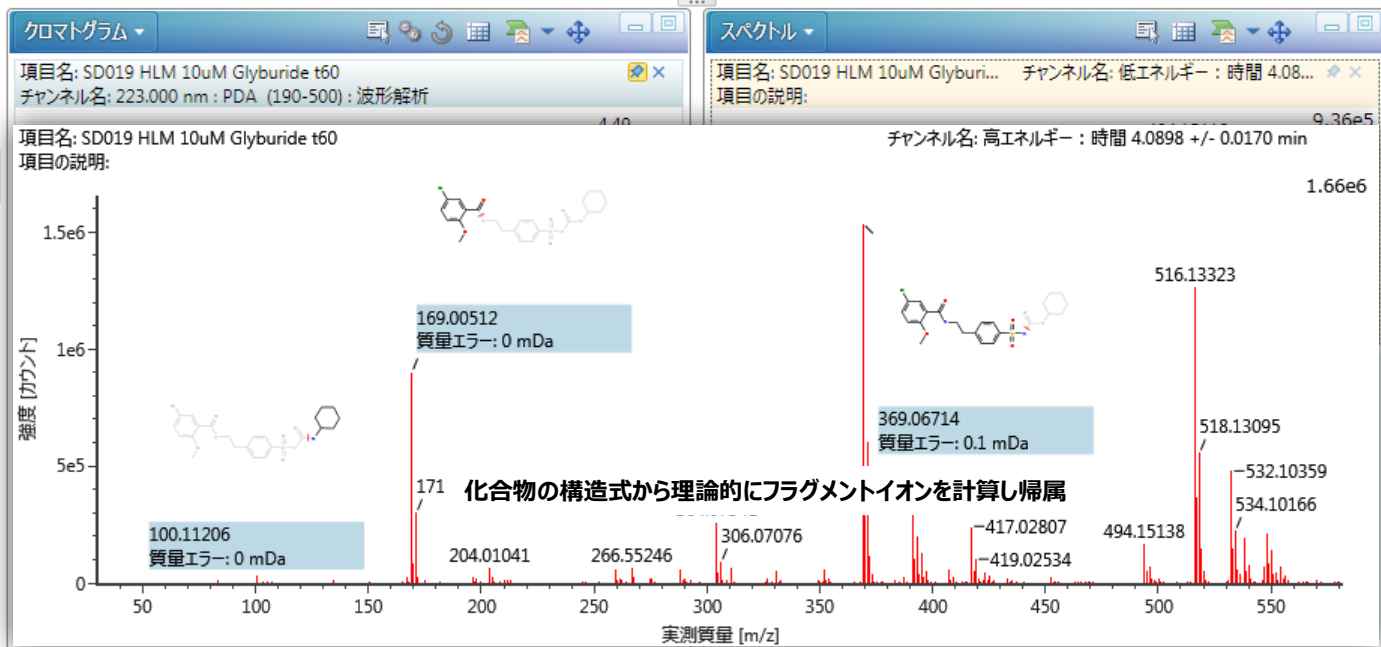
反応の最大数:
フェーズ I:
フェーズ II:

予想される反応を選択

登録化合物およびその予測分解物とに対して、予想される反応との組み合わせにより考えられる化合物を自動予測し検索を行う

類縁化合物解析 解析結果

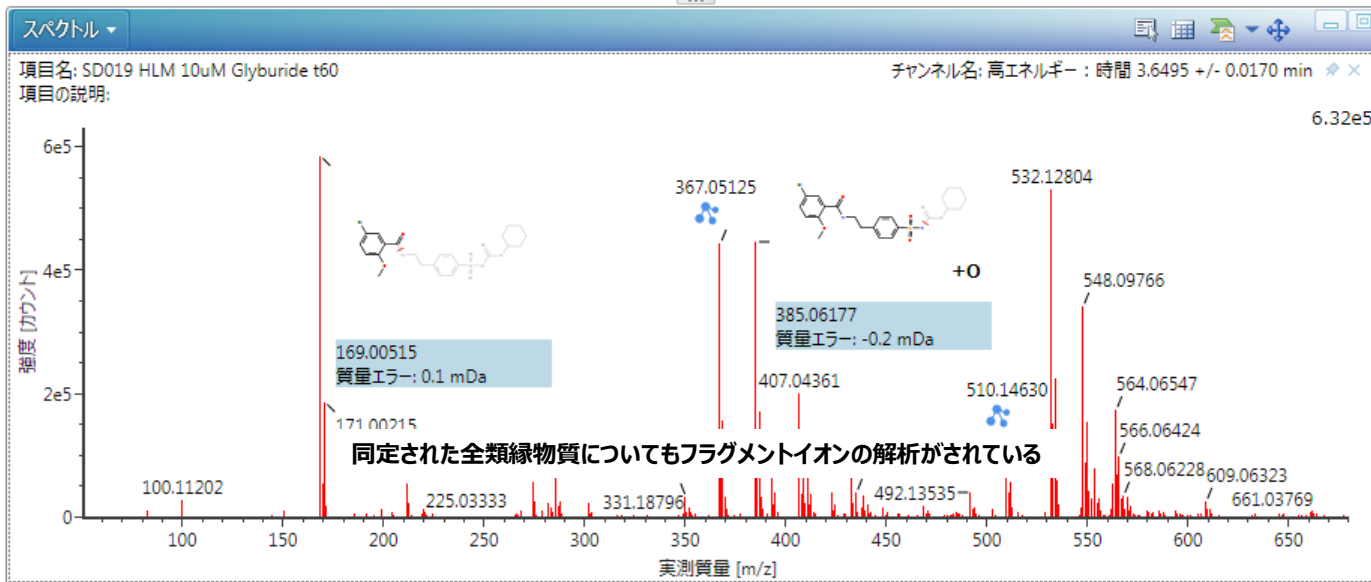
成分名	組成式	実測m/z	実測RT (min)	質量誤差 (ppm)	付加イオン	同位体マッチMz RMS...	同位体マッチ強度RMS/パーセント
1 Glyburide	C23H28ClN3O5S	494.1512	4.09	0.2	+H	0.21	1.97
2 Glyburide+O	C23H28ClN3O6S	510.1459	2.81	-0.2	+H	0.54	1.96
3 Glyburide+O	C23H28ClN3O6S	510.1460	3.65	0.0	+H	0.29	1.28



自動予測ツールなどを用いた類縁化合物解析 解析結果（既知化合物 + O）

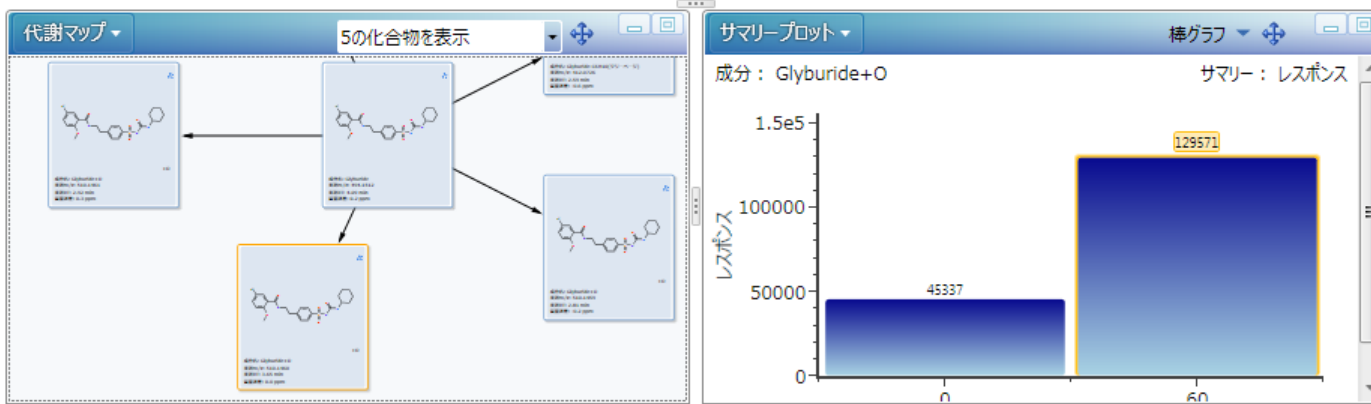
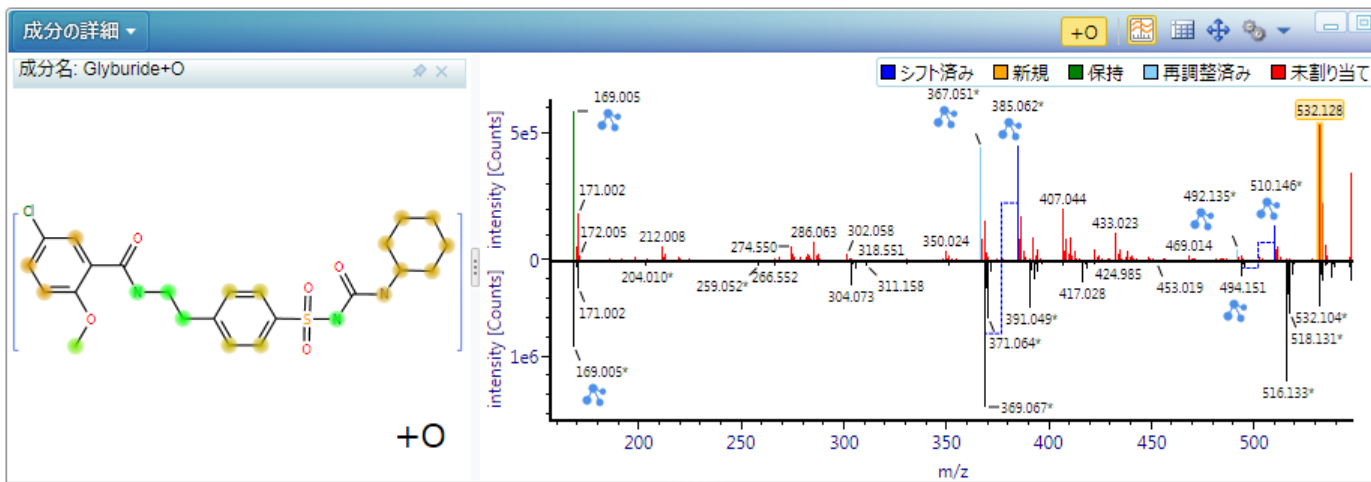
成分サマリー

成分名	組成式	ベストマッチ強度RMSパーセント	検出されたフラグメントの合計	共通フラグメントイオンあり	共通フラグメントイオンが見
2 Glyburide+O	C23H28ClN3O6S	1.96 172136	4	はい	369.0671 (Glyburide)
3 Glyburide+O	C23H28ClN3O6S	1.28 129571	5	はい	169.0051 (Glyburide)
4 Glyburide+O	C23H28ClN3O6S	1.98 69251	3	はい	369.0671 (Glyburide)

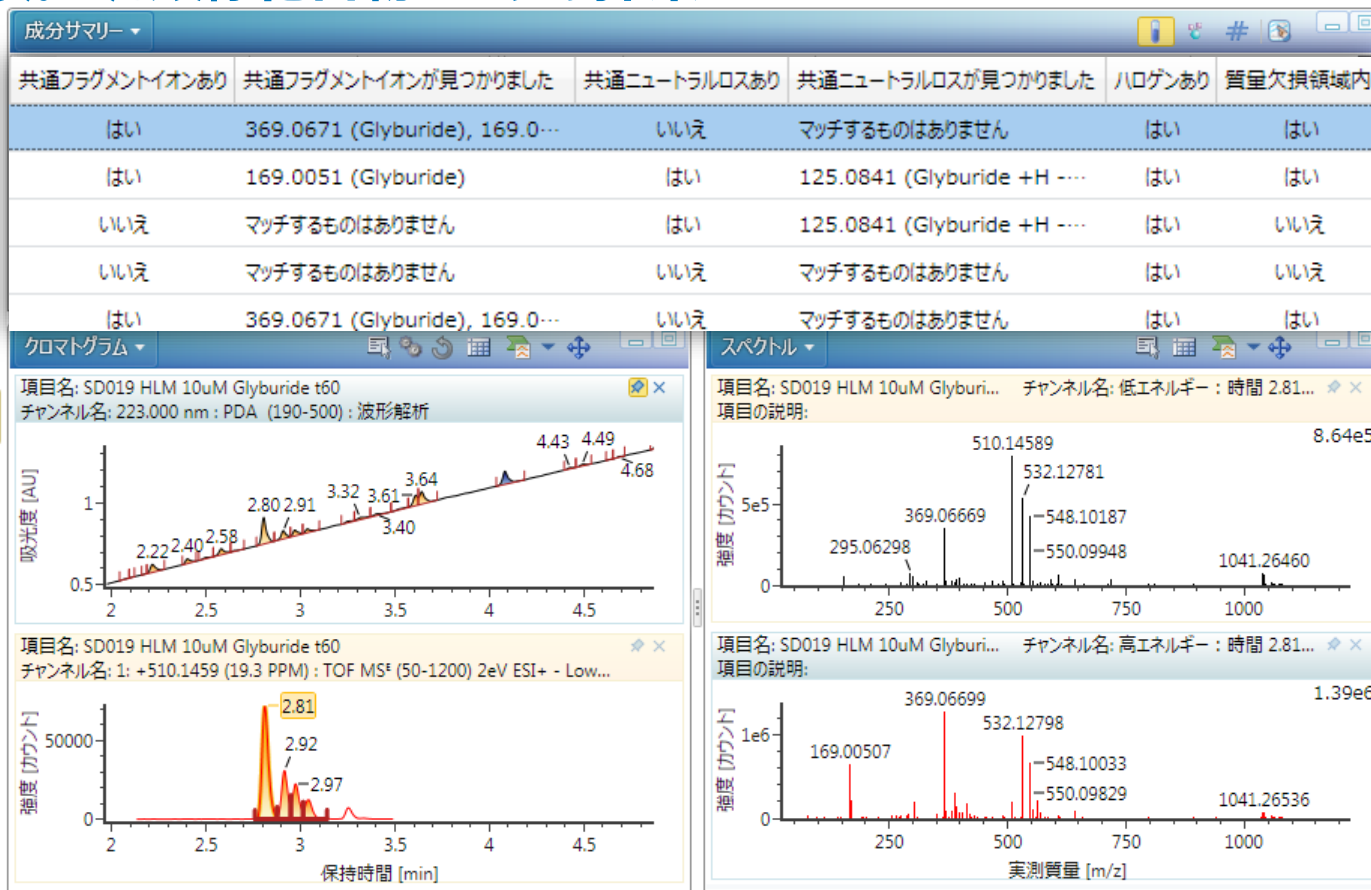


クロマトグラム

自動予測ツールなどを用いた類縁化合物解析 解析結果（既知化合物 + O）

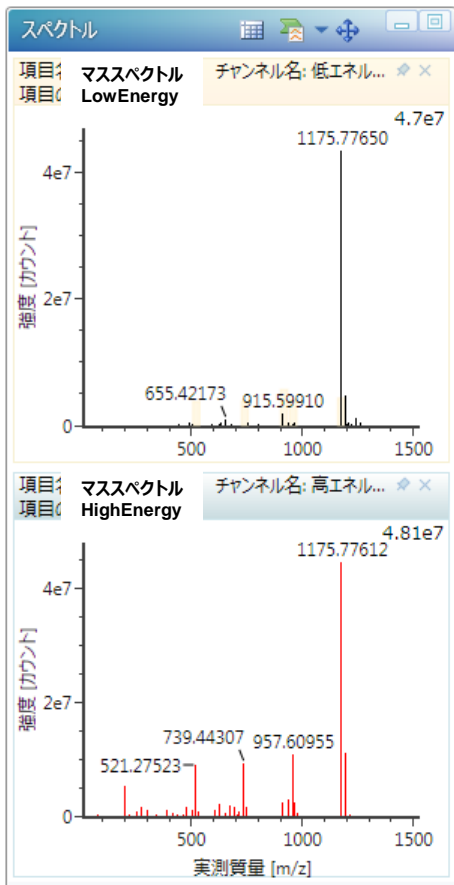


自動予測ツールなどを用いた類縁化合物解析 予測されなかった類縁化合物ピークの探索



- **既知化合物のターゲットスクリーニング解析**
 - サイエンスライブラリーを用いた化合物のスクリーニング
 - 精密質量、RT、フラグメントイオン（およびCCS）を用いたスクリーニング
 - 既知化合物
- **自動予測ツールなどを用いた類縁化合物解析**
 - MetIDや不純物プロファイリングなど
 - 既知化合物の構造などから分解物や反応物などを含む類縁化合物を計算し予測
 - 精密質量、フラグメントイオンを用いてマッチング
 - 既知化合物に関連する情報を用いてピークを検索（フラグメントイオン、ニュートラルロス、ハロゲンの有無など）
- **類縁化合物以外の化合物の解析**
 - 元素組成計算
 - サイエンスライブラリー検索、オンライン化合物DB検索（Chemspider）
 - フラグメントイオン解析（理論的フラグメンテーション）
 - **上記解析を自動化したディスカバリーツール、ボタン一つで化合物同定**
 - **同定した成分をそのままサイエンスライブラリーに登録可能（未知から既知へ）**

類縁化合物ではない化合物の探索 構造推定 (ディスカバリーツール)



基本組成

ディスカバリー

- ライブラリー検索
- ChemSpider検索
- 同位体のマッチ
- 同位体のモデル
- 基本組成
- フラグメントマッチ
- 反応の局所化
- ハロゲンのマッチ
- ニュートラルロス
- 共通フラグメント検索
- マスディフェクトフィルター
- 手動同定

175.7765 チャンネル内: 低エネルギー : 時間 8.7994 +/- 0.0117 min

チャンネル内: 高エネルギー : 時間 8.7994 +/- 0.0117 min

2 mDa

項目	m/z	RMS (PPM)	強度RMS (%)	予測m/z	m/z 誤差 (PPM)	m/z 誤差 (n)
----	-----	-----------	-----------	-------	--------------	------------

割り当て

情報

ディスクバー

パラメーター

ディスクバー 基本組成 ChemSpider フラグメントマッチ

smartsScoresの使用 複数: 4 アルファ: 5 最小DBE: -1.5 モード: 自動

フェニル: 8 その他: 1 水素の相違: 6 最大DBE: 50 ピークを強度によってフィルター処理

芳香族: 6 結合: 2 右記より低いスコアを許可: 8 ニュートラル: オン ピーク数: 0

リング: 2 ヘテロ: 0.5 差 (mDa): 1 Hペナルティ: 0

開始 **キャンセル** これらの処理をボタン一つでバッチ処理

合計付加イオンチャージ: 1 3

元素組成計算 → **オンライン化合物DB検索
またはサイエンスライブラリー検索** → **フラグメントイオンの解析**

割り当て

情報

同義語

ディスカバー

パラメーター

結果(3件)

	m/z	基本組成	i-FIT信頼(%)	共通名	フラグメントマッチ	予測強度(%)	引用
1	1175.7765	C73H108O12	100.00	Irganox 1010	43	34	60
2	1175.7765	C73H108O12	100.00	Bis(2-[4-hydroxy-3,5-bis(2-methyl-2-propanyl)phenyl]...	34	30	8
3	1175.7765	C73H108O12	100.00	3-({3-[4-Hydroxy-2,6-bis(2-methyl-2-propanyl)phenyl]...}propanoate	43	34	2

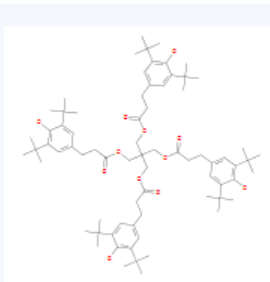
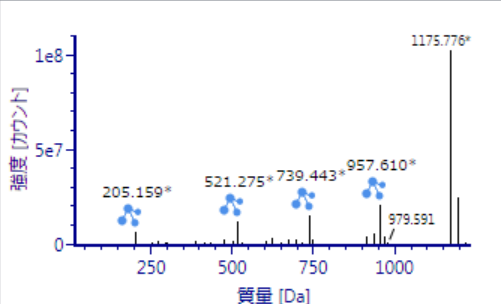
割り当て

情報

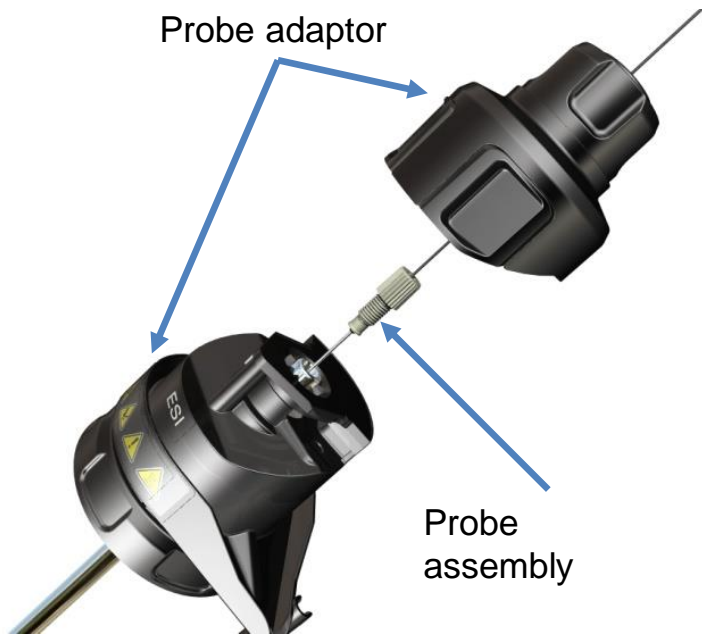
Irganox 1010

同義語

- Irganox 1010
- Pentaerythritol Tetrakis(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propanoate)
- Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethyl-2-propyl-4-hydroxyphenyl)propanoate
- 3-({3-(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propanoate)propanoate
- 3-({3-(3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propanoate)propanoate
- 3-({3-[4-Hydroxy-3,5-bis(2-methyl-2-propanyl)phenyl]propanoate
- benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethyl-2-propyl-4-hydroxyphenyl)propanoate

メンテナンス性

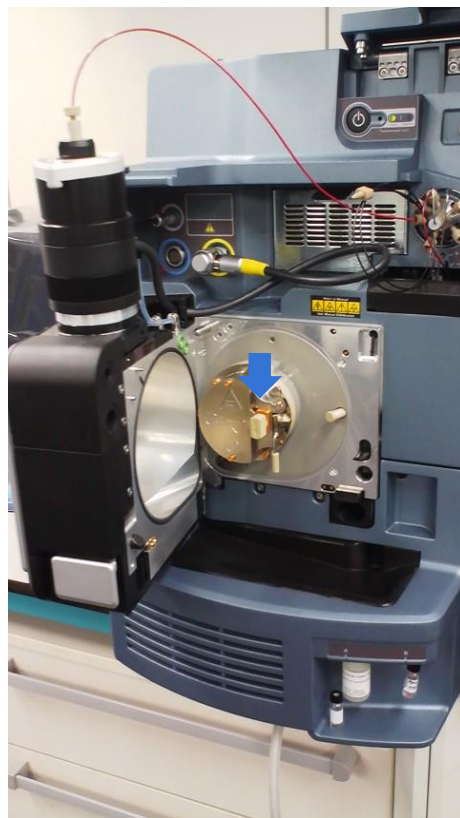
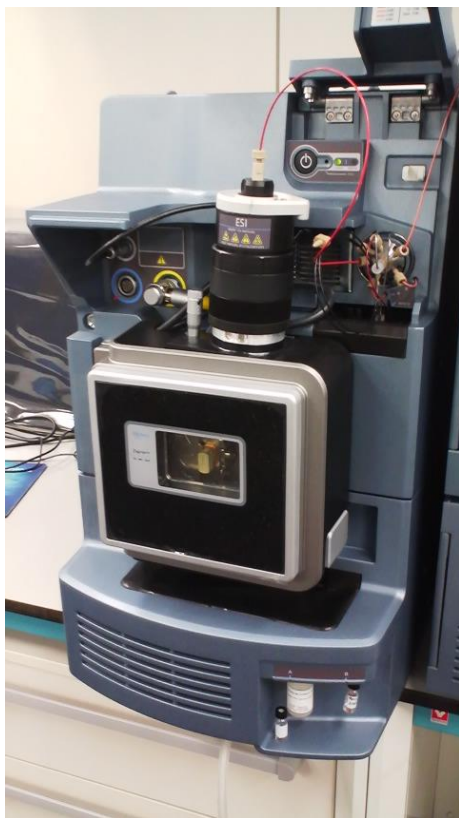


キャピラリー:



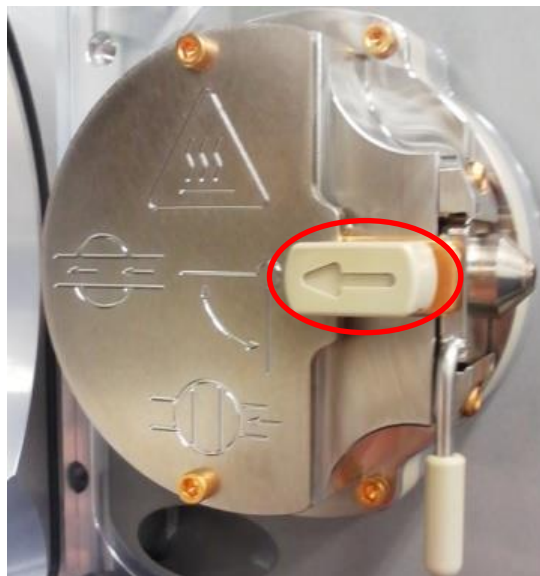
- 組み立て済みキャピラリー
- 位置合わせが不要

メンテナンス時の真空解除を不要にするためのアイソレーションバルブ

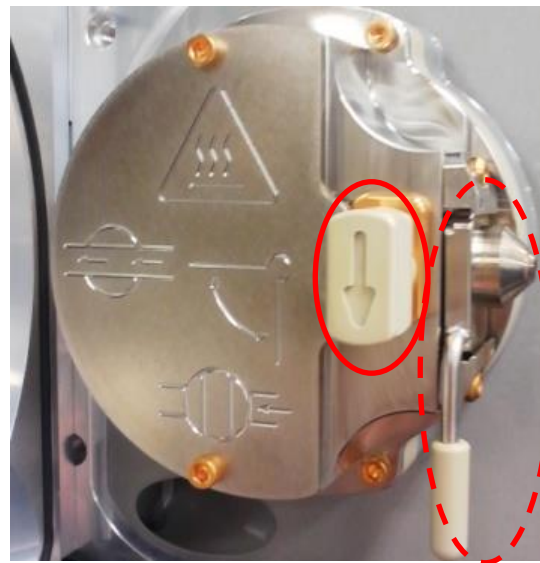


※写真はタンデム四重極MSです。
イオン源の構造は同じです。

メンテナンス時の真空解除を不要にするためのアイソレーションバルブ



アイソレーションバルブ開
(分析時)



アイソレーションバルブ閉
(メンテナンス時)

- ①バルブ閉め
- ②コーン取り外し

- ✓ アイソレーションバルブを閉めれば、サンプリングコーン及びコーンが簡単に取り外し、用意にメンテナンス可能。
- ✓ コーン洗浄後、取り付けバルブを開けば、すぐに分析に復帰できる。(真空度を上げる時間が不要)

拡張性

AGGC GC-MS用イオン源

DESI 質量分析イメージングイオン源

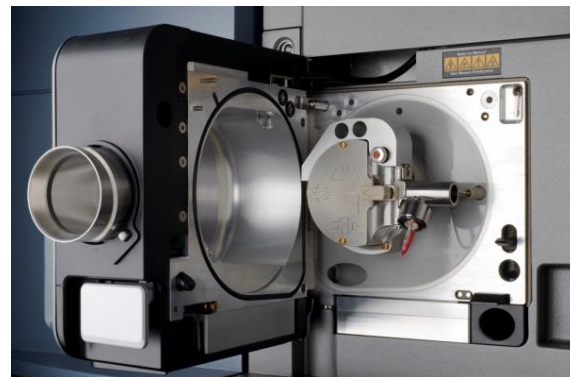
GC-MSへの拡張が可能

Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™



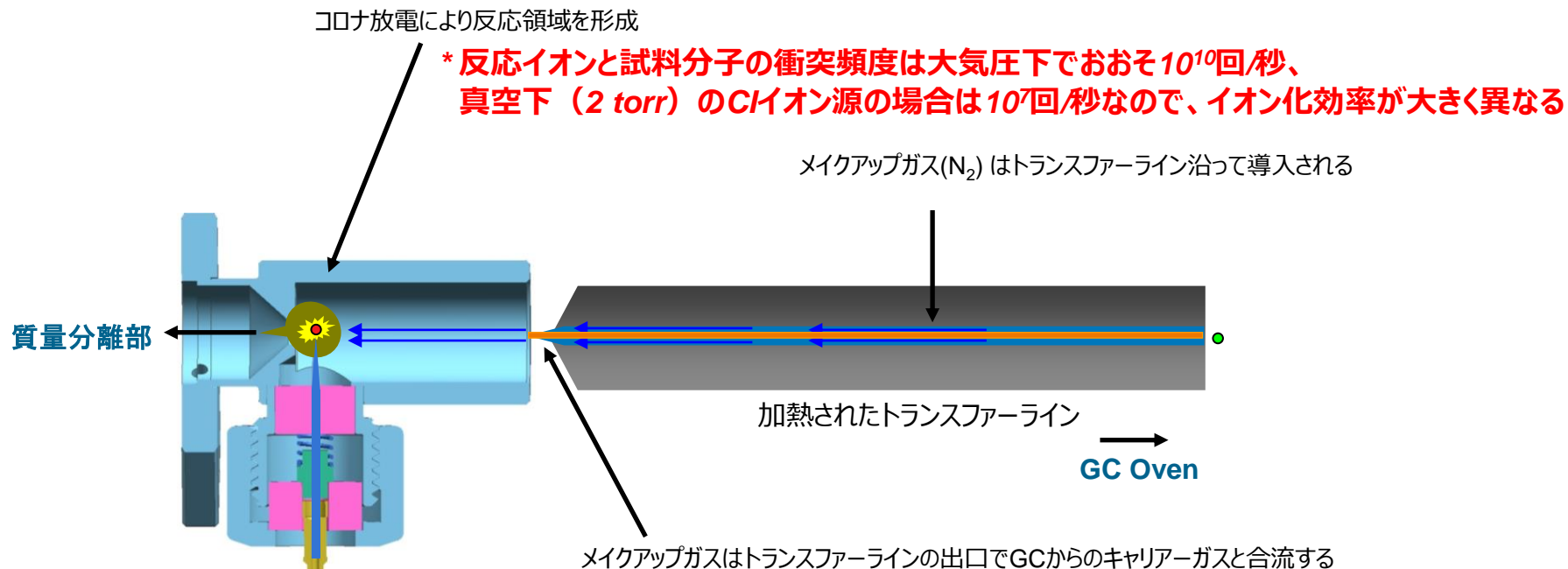
キャリアーガスの影響を受けないGC-MS用イオン源APGC

- LC-MSで用いられるAPCI（大気圧化学イオン化）法をベースにして、GC-MS用に開発されたイオン源
 - ⇒ Atmospheric Pressure GC の略です
 - ⇒ 大気圧下でイオン化を行うイオン源です
 - ⇒ 大気中のイオン化であり、微量なキャリアーガスの影響を受けません



APGCイオン源 ≠ APCI、≠ 真空下のCI 同じ様で少し違う

1. はじめから化合物は気化している ≠ APCI
2. 大気圧下の反応イオン領域に導入される ≠ 真空下のCI



GC-MSで一般的なEI法

ハードなイオン化

- ✓ フラグメンテーションによる感度低下、選択性の低下
- ✓ 分子量情報の損失

真空中でのイオン化

- ✓ GCのキャリアーガスの種類、流量の制限
- ✓ メンテナンス時に真空解除が必要

APGCで用いるAPCI法

ソフトなイオン化

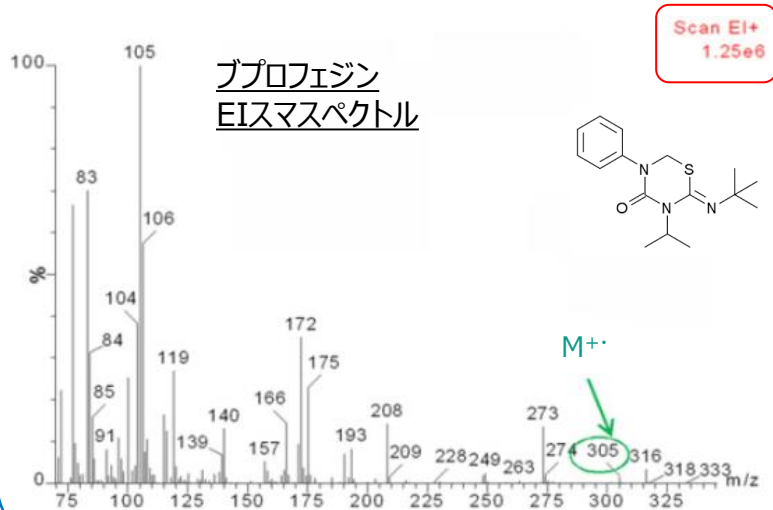
- ✓ フラグメンテーションを抑えることで**高感度**
- ✓ **分子量情報**の取得が容易
- ✓ MRM法を用いることでさらに高感度と高い選択性

大気圧下のイオン化

- ✓ **幅広いGCメソッド**に対応
(N₂ガスキャリアの使用や高速分析)
- ✓ メンテナンス時に**真空解除不要**
- ✓ **LC-MSとGC-MSの切り替えが可能**

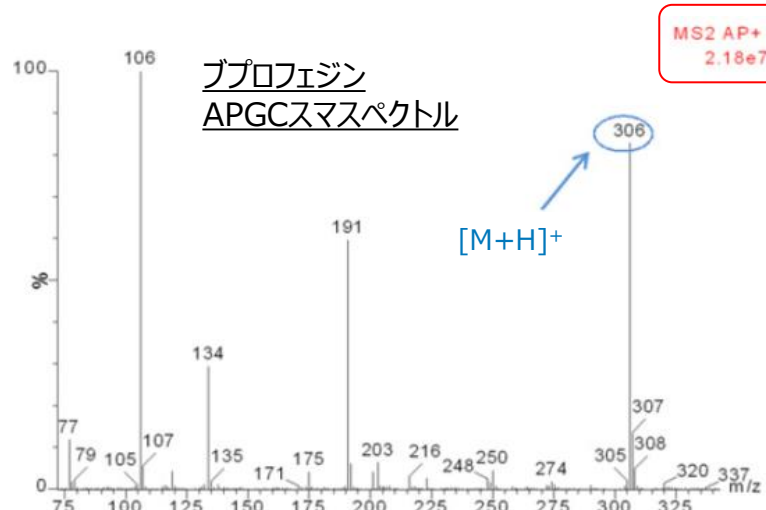
GC-MSで一般的なEI法

- EI法ではM⁺が検出できない農薬
(ブプロフェジン、ピリプロキシフェンなど)
- 激しいフラグメンテーションによる感度ロス



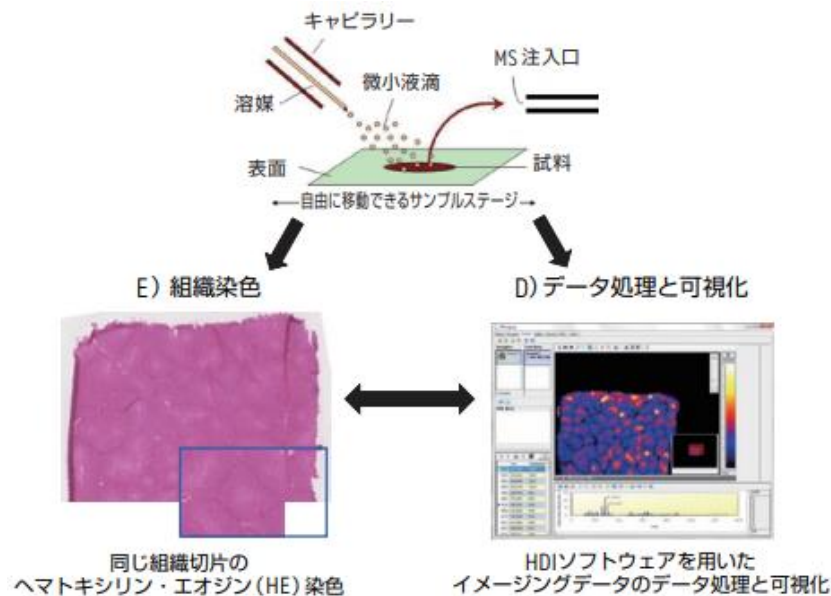
APGCで用いるAPCI法

- 分子量情報を示すイオンが確認できる
- フラグメンテーションが少なく、高感度



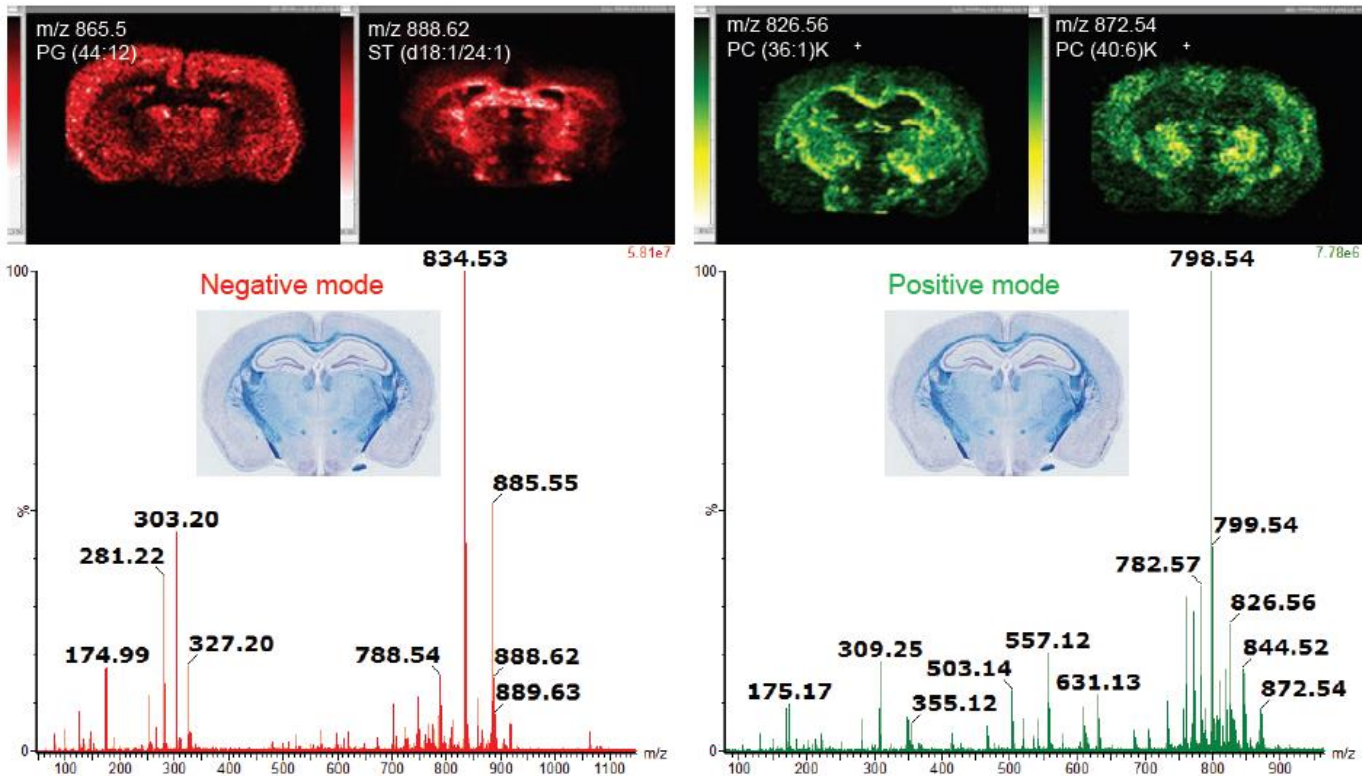
DESI 質量分析イメージングワークフロー

DESI: Desorption Electrospray Ionization (脱離エレクトロスプレーイオン化)



MALDIのようにマトリックス塗布が不要
マトリックス由来のイオンがない

脂質イメージング : マウスの脳切片





Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

窪田 雅之

日本ウォーターズ株式会社

クリニカル事業部

マーケティングマネージャー

理学博士、医用質量分析認定士

携帯電話：070 7595 0983

email：masayuki_kubota@waters.com

web：www.waters.com

住所：東京都品川区北品川1-3-12 第5小池ビル