開催報告【WEB】令和5年度質量分析講習会
-マススペクトル解析の応用-1-

【開催日時】　2024年2月2日(金) 13時30分～16時00分(途中参加・途中退室可)

【場所】WEB ミーティング(ZOOM)

【世話人】質量分析技術者研究会　講習会担当：大阪大学　三宅里佳、奈良先端科学技術大学院大学　西川嘉子、鳥取大学　横野瑞希、北海道大学　岡征子、名古屋大学　瀧健太朗、大阪公立大学　江上美佳

【講師】高橋　豊　氏（エムエス・ソリューションズ株式会社）

【参加対象者】MS測定経験者および今後、測定する予定のある方。

【参加者】39人

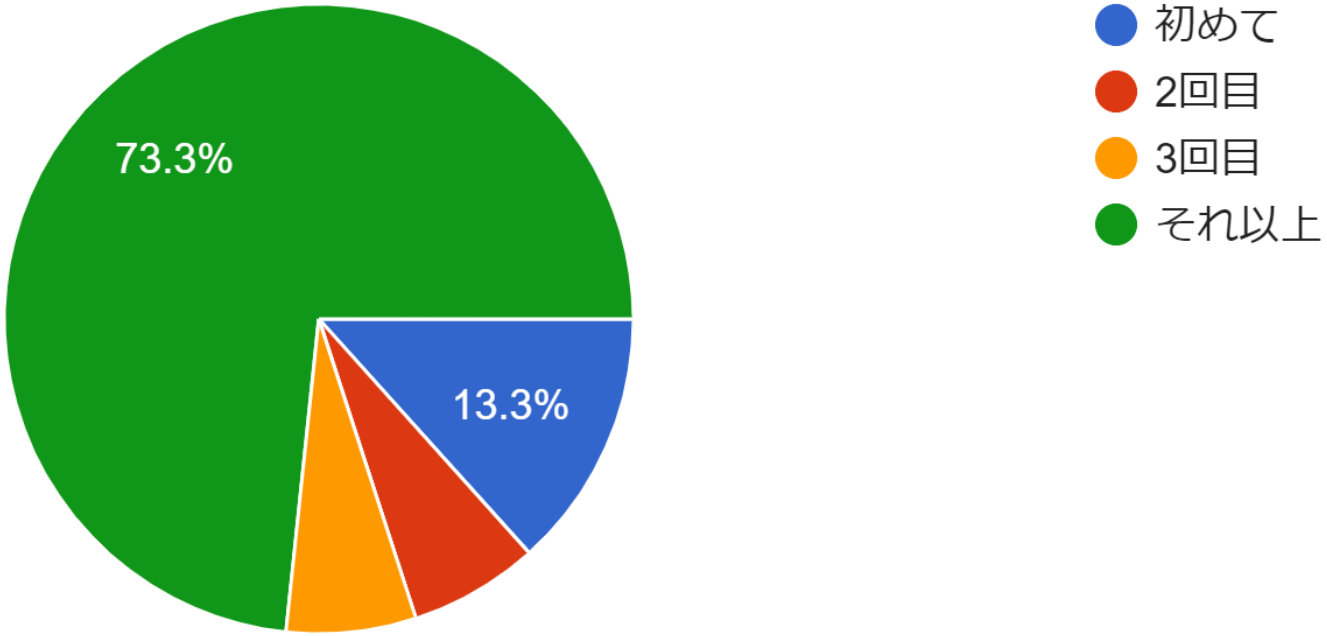
【プログラム】

13:30-16:00

(1) 測定条件とマススペクトルの関係
(2) マススペクトル解析におけるマスディフェクト値の活用
(3) イオンのm/z 値を正確に得るために

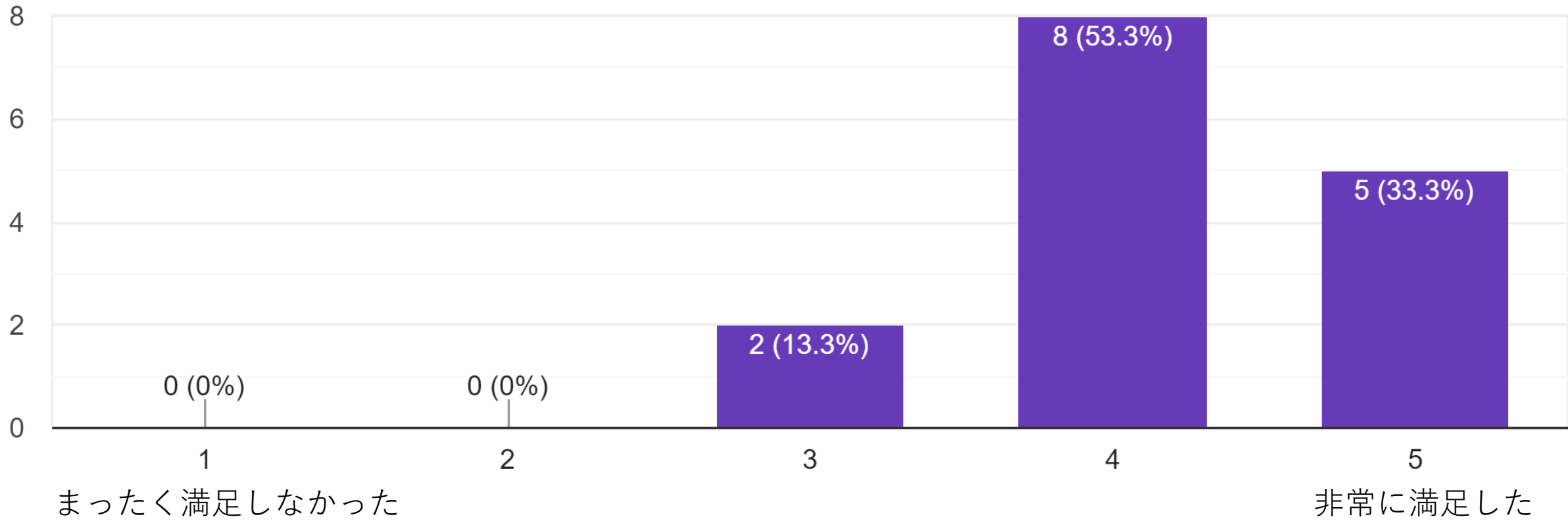
設備ネット　質量分析講習会への参加は初めてですか？

15 件の回答



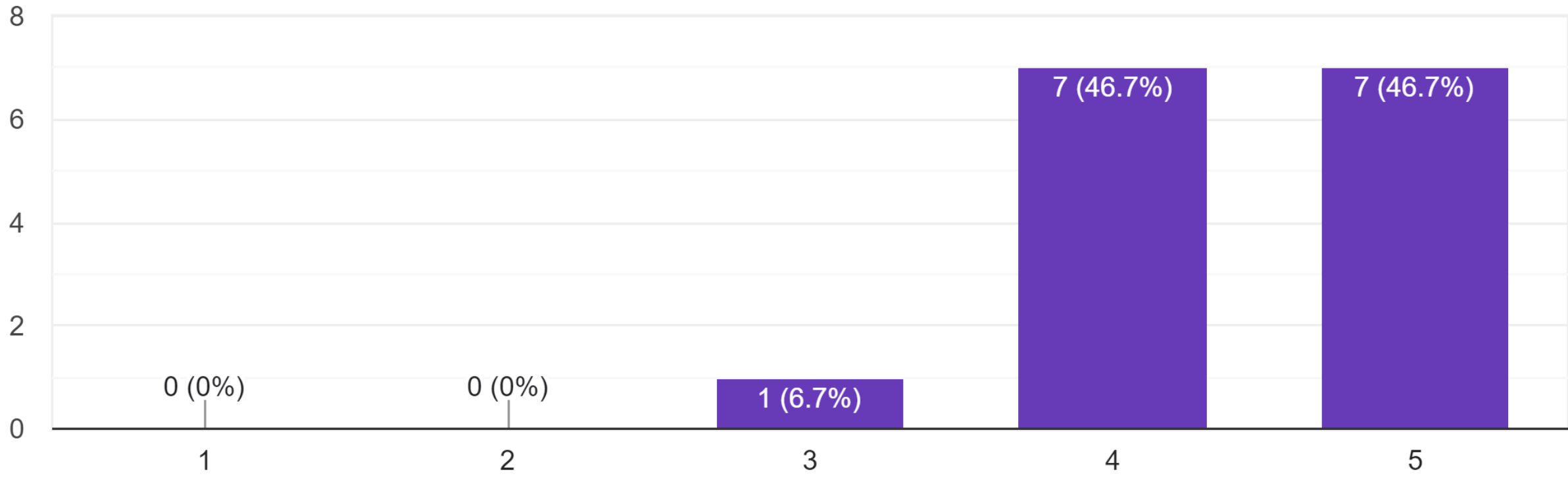
セミナーにはどのくらい満足されましたか。

15 件の回答



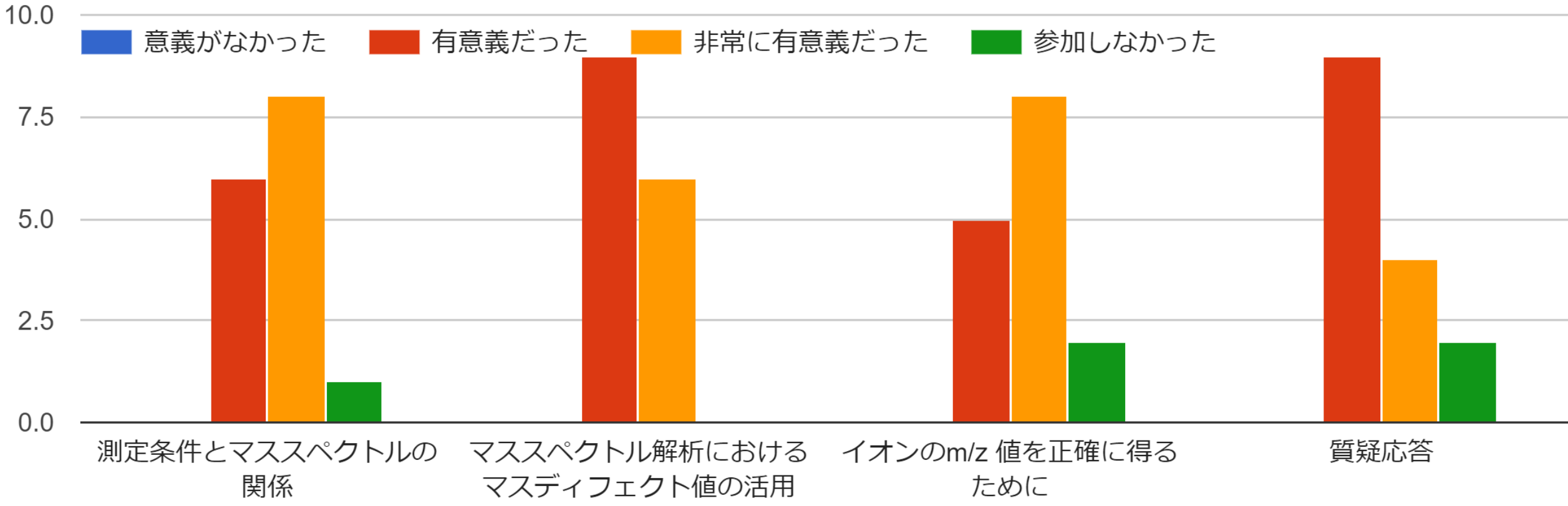
ご自分の仕事との関連性や、仕事に役立つ部分はありましたか。

15 件の回答



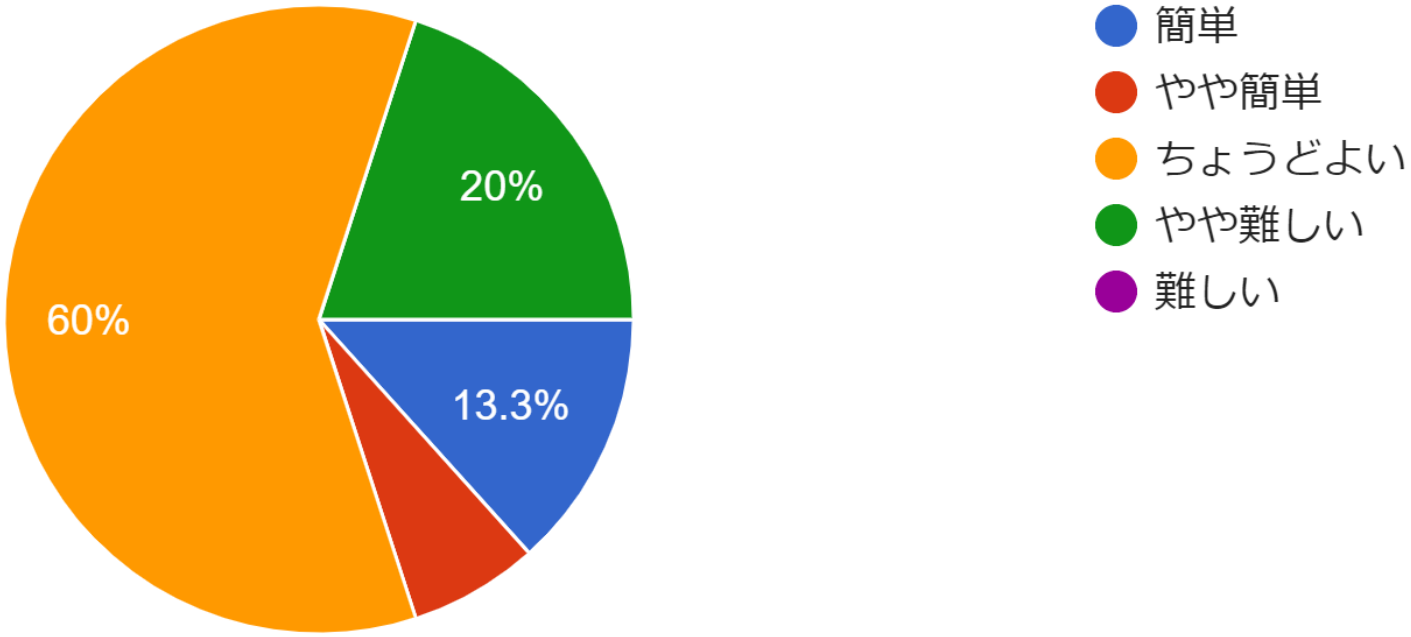
まったくなかった　　非常にあった

セミナーの各セッションは、どのくらい有意義だと感じましたか。



今年度より、講習会参加習熟度をご自身で把握していただくために問題を作成いたしました。
問題は難しかったでしょうか。

15 件の回答



質問があればご記入ください。可能な限りフィード バックします。

- OrbitrapとTOFの質量確度の違いについて質問意見が出ていましたが、TOFを使っているとイオン量によって確度がずれるという経験は実感としてもあります。普段Orbitrapは使っていないので、そちらの方はあまりよく理解できませんでした。2018年のぶんせきにOrbitrapの記事が載っていましたが、それによると「AGC（イオン量制御機能）が優秀だから、質量確度が安定しやすい」という旨の内容が書いてありましたが、その理解でよいのでしょうか？

- AGCの機能とOrbitrapに導入されるイオン量については、先日のセミナー時にもご質問がありました。その時の質問者は、私が示したイオンプロファイルが、SIM（Orbitrapでは原理的にSIMは出来ないので、1つのイオンあるいはそれに近い限られた狭いm/z範囲のイオンのみを取り込む）で測定されたものと思ったようで（私も測定条件は示しませんでしたが）、そのような条件で測定された場合、低濃度サンプルでもAGC機能によってある程度まとまった量のイオンをOrbitrapに導入するので、ピークのS/Nはそれ程悪くならず、m/z値の確度は高く保たれます。一方で、広いm/z範囲でマススペクトルを測定する場合、低濃度試料ではAGCがあっても他のイオンを相対的に沢山取り込むので、試料由来のイオン強度は低くなり、S/Nも悪くなります。しかし、私もOrbitrap系の装置を長い間使っていますが、ピークの裾の形状が多くのTOF装置（実際には検出系の特徴ですが）に比べると、とても良いと思っています。スペクトル取込時の処理として、ベースラインを切っているという事も関係しているとは思いますが。

  TOFで使っている検出器はMCPで、マイクロチャネル内でのイオンの跳ね返りがあるので、ピークプロファイルの裾を引く傾向があります。先日使った資料のPDFを添付しますが、p. 62, 63のデータを比べると、TOFよりOrbitrapの方が、低濃度時のピーク裾の形状が良いのが分かります。と言う訳で、AGCの機能によってm/z確度が高いというのはもちろんあると思いますが（高濃度試料の時は、AGCの機能が効くと思います）、私的には同時に、検出系の特性によって、広い濃度範囲でピーク形状が良い状態に保たれる事、そしてp. 65に示すm/z軸でのサンプリングポイントの分解能が高い事が理由かなぁと思います。

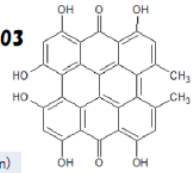
  もちろん、p.65の例は、あくまでもこのデータ取得に使った装置によるものなので、TOFにしろOrbiにしろ、他の装置を使えば違ってくるのは言うまでもありません。

*m/z*値の確度と精度　装置の特性を理解する－2

Thermo LTQ-Orbitrap XL
測定*m/z*範囲：200－2,000

Hypericin, $C_{28}H_{34}O_{15}$
Monoisotopic mass 504.084503

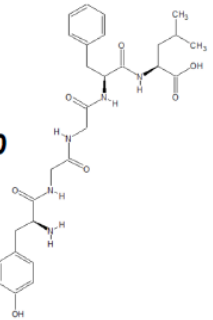
[M-H]⁻　503.07614



Intensity	Obs. *m/z*	Error (ppm)
4.99E+06	503.07617	0.1
4.44E+07	503.07593	-0.4
6.62E+07	503.07593	-0.4
1.53E+07	503.07651	0.7
2.40E+06	503.07617	0.1
1.14E+06	503.0759	-0.5
9.00E+05	503.07602	-0.2
8.86E+05	503.07617	0.1
8.10E+04	503.07532	-1.6
5.09E+04	503.0759	-0.5

(QTOF)
Waters Synapt G2-XS
測定*m/z*範囲：200－2,000

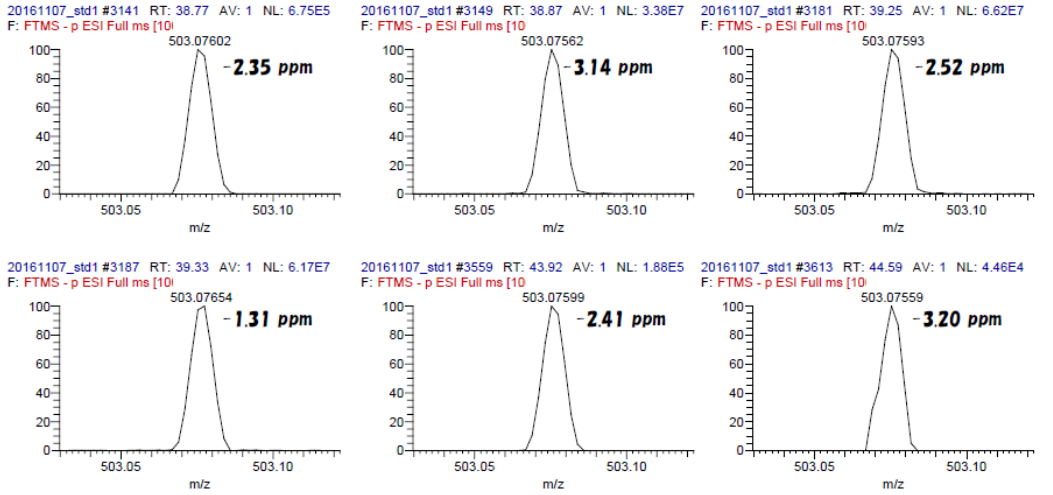
Leucin-Enkephalin, $C_{28}H_{37}N_5O_7$
Monoisotopic mass 555.26929
[M+H]⁺　556.27657



Intensity (Profile)	Intensity (Centroid)	Obs. *m/z* (Profile)	Centroid *m/z*	Error (ppm)
659	2.44E+03	556.2758	556.2766	0.05
4.00E+03	1.43E+04	556.2758	556.2773	1.31
2.06E+04	6.54E+04	556.2758	556.2775	1.67
1.14E+05	3.16E+05	556.2758	556.2784	3.29
1.58E+05	4.21E+05	556.2758	556.2787	3.83
1.26E+05	3.49E+05	556.2758	556.2783	3.11
3.28E+04	1.03E+05	556.2758	556.2783	3.11
1.25E+04	4.15E+04	556.2758	556.2782	2.93
4.70E+03	1.61E+04	556.2758	556.2793	4.91
990	3.65E+03	556.2758	556.2798	5.81

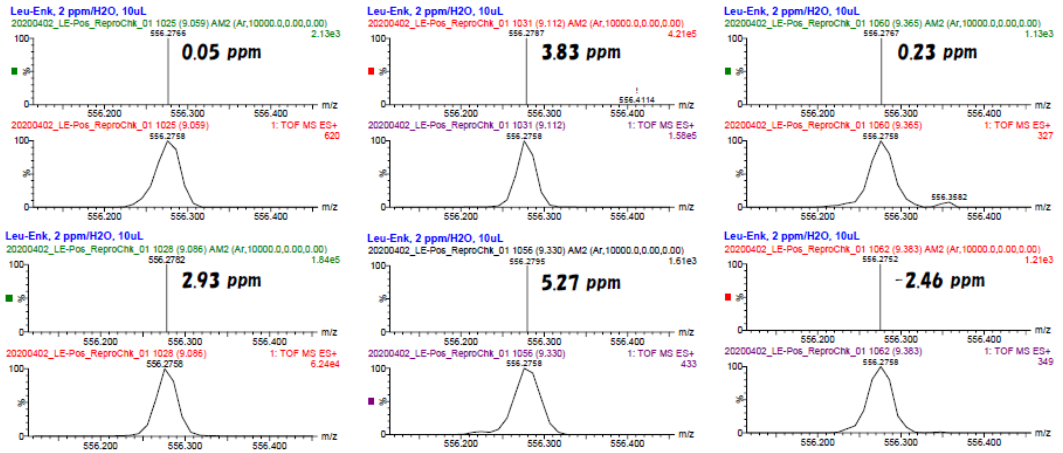
データポイント毎のピークプロファイルと*m/z*値（同一LC/MSデータ）

Thermo LTQ-Orbitrap XL



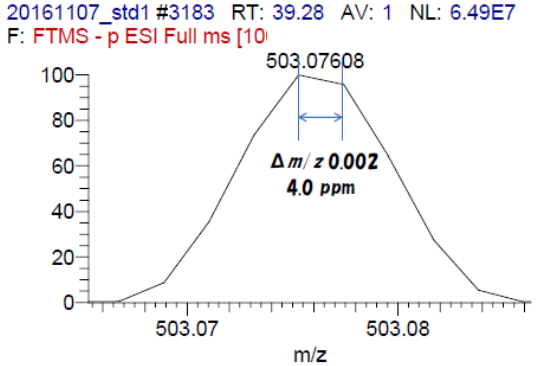
データポイント毎のピークプロファイルとピーク検出結果（同一LC/MSデータ）

Waters Synapt G2-XS

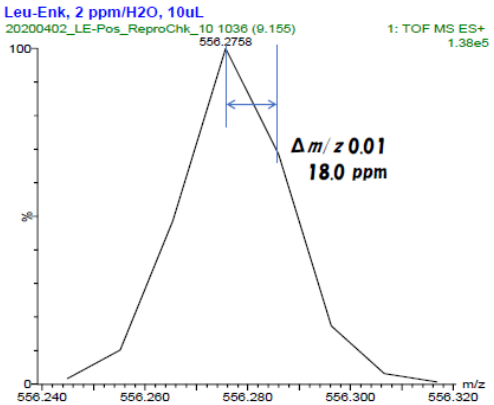


プロファイルスペクトルにおけるサンプリングポイントの比較

Thermo LTQ-Orbitrap XL



Waters Synapt G2-XS

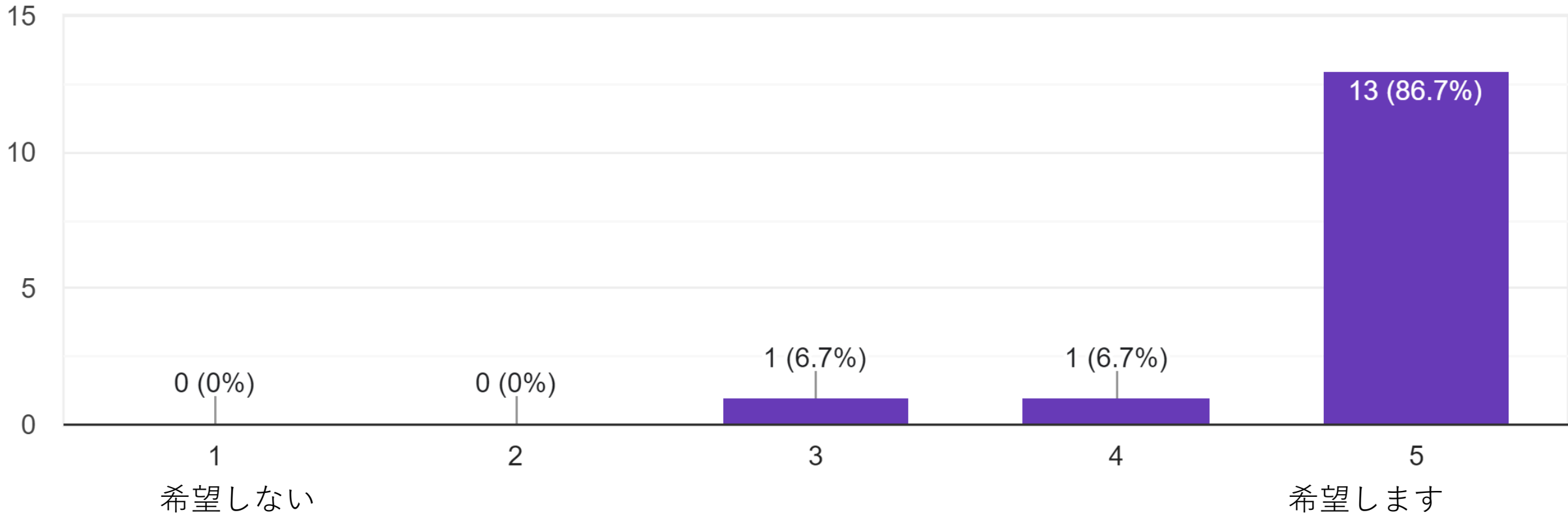


このセミナーの感想をご自由にお書きください。

- 共通テストの問題，簡単になったんですね…
- センター試験の解説が興味深かった．この試験を受けた大学生が入ってくるということも参考になりました．試験問題の用語の間違い探しについて、ラジカルカチオンなのにカチオンで書いている点が気になりました．
- 前半部分が残念ながら参加できませんでした。メンバー限定＆期間限定で、録画を公開するなどはできないのでしょうか。
- 普段精密質量が得られる質量分析装置を使用していないため、マスディフェクト値に関する内容など新たな知識が得られ、とてもためになりました。

今後もこのようなセミナーの開催を希望されますか。

15 件の回答



今後企画してほしいセミナー内容やご意見ございましたらご記入ください。

- 業務の都合で全体を通して参加することができませんでした。セミナー資料のダウンロードと録画オンデマンド配信を希望します。ご検討の程よろしくお願いいたします。
- GCTOFMS装置を担当しているので、可能であれば、GCMS装置に関するセミナーも希望致します。
- ソフトウェア比較

鳥居_名大
吹上（岩手大）

藤井大輝
鳥居_名大
吹上（岩手大）
岩手　水戸部
中島泰洋
六本木 誠（宇都...
中尾上純平
佐賀大学新地
増永幸