

# LC/MS概要

## —質量分析計のデータ取得技法—

エムエス・ソリューションズ(株)代表取締役

(株)フレックス 代表取締役

浜松医科大学細胞分子解剖学講座特任研究員

質量分析コンサルタント

高橋 豊

2024年7月26日 質量分析講習会

質量分析に関するコンサルティング、技術指導、セミナー、LC/MS用脱塩チューブ開発

## 質量分析の問題解決を強かにサポート

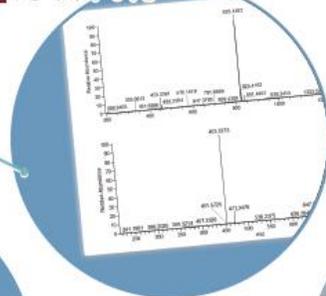
事業開始：2010年8月

コンサルティング・技術指導等実績

- ・医薬基盤研究所
- ・国立医薬品食品衛生研究所
- ・早稲田大学理工学部
- ・ENEOS株式会社
- ・味の素株式会社 他30機関以上

技術者が現場に出向き分析からデータ解析までを代行いたします。貴社の試料に関する作業上のアドバイスなど、将来的な運用への引き継ぎのご要望にも対応いたします。

### 分析代行



LC/MS の条件設定やデータの解析でお困りではありませんか？ コンサルタントが現場に出向き、一緒に問題を分析、解決策をご提案します。LC/MS 装置や各種ソフトウェアの選定などについても、貴社の視点に立ってお手伝いいたします。

### コンサルティング



### ソルナック

特許申請中のソルナックチューブをはじめとするオンライン脱塩製品。

- リン酸塩緩衝液を用いたオンライン LC/MS 分析
- TFA によるイオン化阻害の改善
- Na,K などの付加イオン削減



### カスタム品開発

専用の周辺機器があったらよいのに、といったご不満をお持ちではありませんか？ 大手のメーカーさんでは対応できない、一点もののカスタム品についても、受注開発を請け負います。

### ソルナックを使用した受託分析

ソルナックを貴社の LC/MS に接続して行います。

### 受託分析

LC/MS を中心に、リーズナブルな価格で分析を請け負います。

### インハウスセミナーへの講師派遣

初心者向けの質量分析の基礎原理から上級者向けの分析上のノウハウまで、ご要望いただいた内容でセミナーを行います。



事業開始：2019年4月 質量分析イメージング、LC/MSの受託事業

「不老不死を目指した知財を世に出す」  
それが弊社のミッションです。



発起人 瀬藤光利

私たちは超高齢化社会に備え(フレック)して、老化や老化関連疾患の予防、診断、治療の研究を進めています。まずはその中で培われた質量分析とイメージングをコアにした生体分子の同定、観察、操作の技術を世の中に還元しつつ、いずれはよりヒトに直結した技術や製品を世に出して行くことが我々のミッションです。

「質の高い質量分析データを提供する」  
それが私たちの想いです



取締役社長 高橋 豊

近年、IMSやLC/MSに用いられる質量分析計の発展には目覚ましいものがあります。様々なアプリケーションに対応した専用ソフトも次々と開発され、誰でも簡単に分析結果を取得できるようになりました。しかし、装置やソフトに任せて得られた結果が正しいとは限りません。私達は、生データをしっかり確認し、信頼性の高いデータを提供します。

### イメージング質量分析 の受託事業

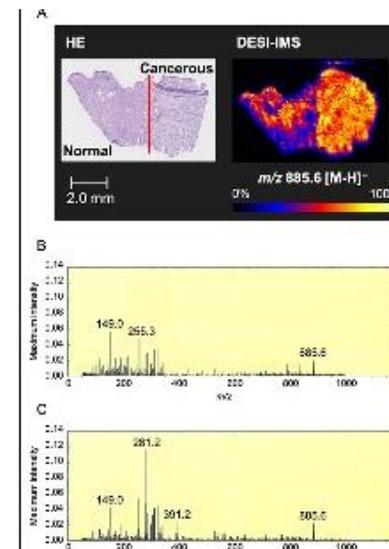
#### 使用装置

#### MALDI

Blaker Solarix (FT-ICRMS)  
Ultraflex (TOFMS)  
Shimadzu IMScope (IT-TOFMS)

#### DESI

Waters Xevo QTOF  
Xevo TQ-XS



K. Tamura, M. Horikawa, S. Sato, H. Miyake and M. Setou, *Oncotarget*. 2019; 10:1688-1703

### LC/MS受託事業

#### 使用装置

Thermo Q-Exactive  
Blaker Solarix (FT-ICRMS)  
Waters Synapt (Q-TOFMS)  
Xevo TQ-XS

# 内容

- 質量分析計のデータ取得方法
- MS/MSの種類

# 質量分析計のデータ取得方法

TOF, Orbtrap, FT-ICRでは原理的に使えない

↑  
マススペクトルを取得するための電圧走査のこと

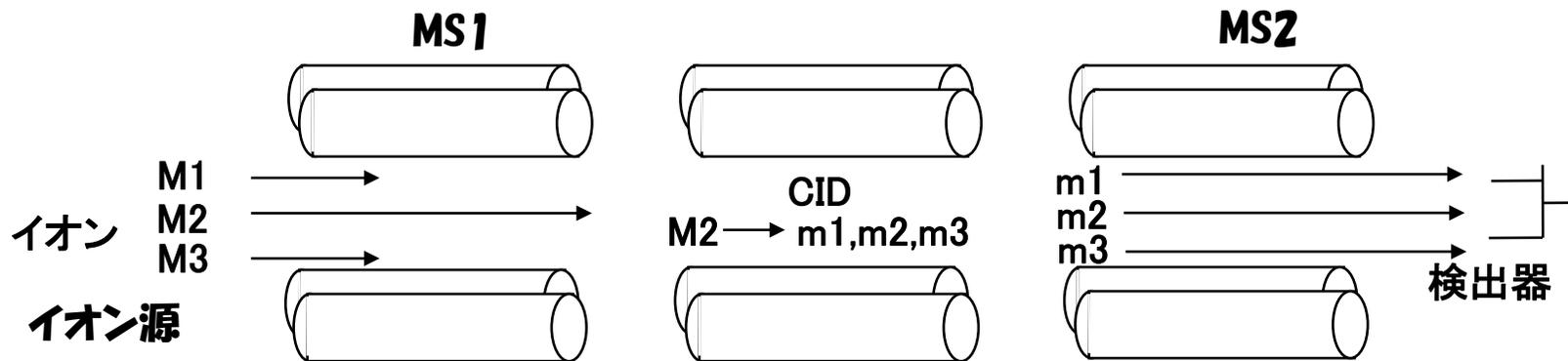
## ➤ マススペクトルを取得する

- ✓ 主としてイオン源で生成したイオン<sup>(安定な)</sup>を検出する方法 ← フルスキャンマススペクトルなどと呼ばれる
- ✓ MS/MS → 全部で5種類

## ➤ マススペクトルを取得しない

- ✓ 選択イオンモニタリング(selected ion monitoring, SIM)
- ✓ 選択反応モニタリング(selected reaction monitoring, SRM)

# MS / MSの種類

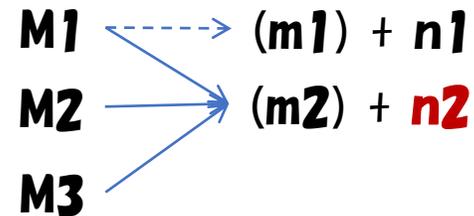
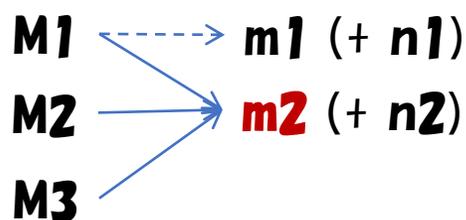
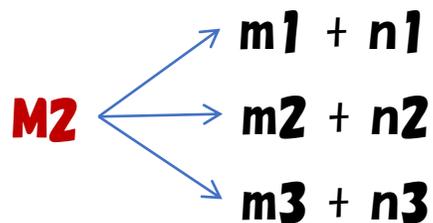


特定イオンを選択

イオンの分解

生成イオンの分離・検出

CID: Collision Induced Dissociation 衝突誘起解離



プロダクトイオン分析(スキャン)

プリカーサーイオンスキャン

コンスタントニュートラルロススキャン  
(コンスタントニュートラルマスゲインスキャン)

選択反応モニタリング(SRM)

プロダクトイオン分析, SRM → 全てのMS/MS装置で可能

その他3種、~~~~スキャン → MS2が電圧走査型のMS/MS装置でのみ可能

# 最も汎用されるMS / MSの種類

➤ 定性分析 → フロダクトイオン分析(スキャン)

フロダクトイオンスキャン: QqQ, IT(ポールトラップ), Sector MS2が電圧走査(スキャン)可能なMS / MS装置の場合

フロダクトイオン分析: Q-TOF, Q-Orbitrap, Q-FTICR

➤ 定量分析 → SRM

# 間違い易い用語

## スキャン、スキャンスピード

**スキャン**: マススペクトルを取得するための電圧掃引のこと

**スキャンスピード**: 1枚のマススペクトルを取得するのに要する時間

これらの用語が使えるのは・・・

⇒ マススペクトル取得のために電圧掃引するタイプの質量分析部のみ

四重極、イオントラップ、セクター ⇒ ○ フロダクトイオンスキャン

Orbitrap, ICR, TOF ⇒ × フロダクトイオン分析

**原理的に正しくない用語は使わない方が良い！**

# フロダクトイオン分析の種類

## ➤ フリカーサーイオンを指定する方法

PRM (parallel reaction monitoring) ← Thermo

MS/MS ← Waters, Bruker

## ➤ フリカーサーイオンを指定しない方法

DDA (data dependent acquisition)

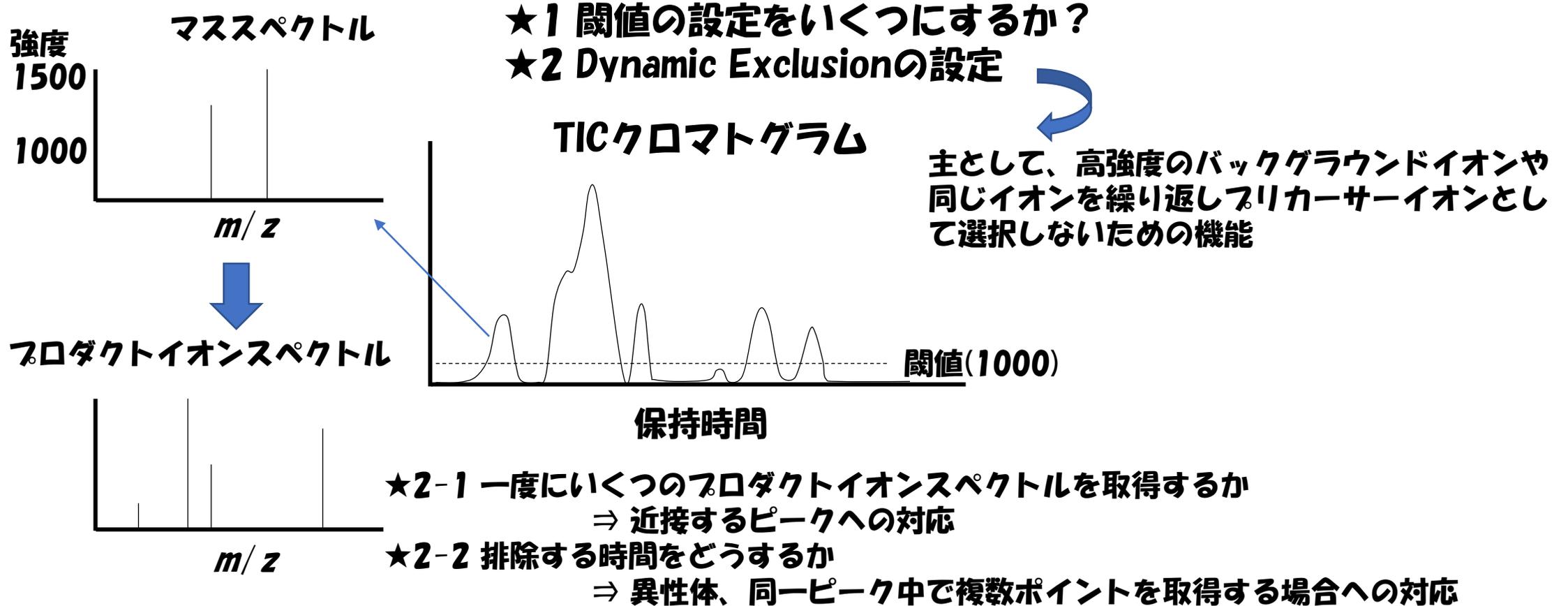
設定条件に合致したイオンを自動でフリカーサーイオンとして認識  
(イオン強度、本数など) → フロダクトイオン分析

DIA (data independent acquisition)

設定した $m/z$ 幅のイオンをまとめてMS/MS (フロダクトイオン分析)

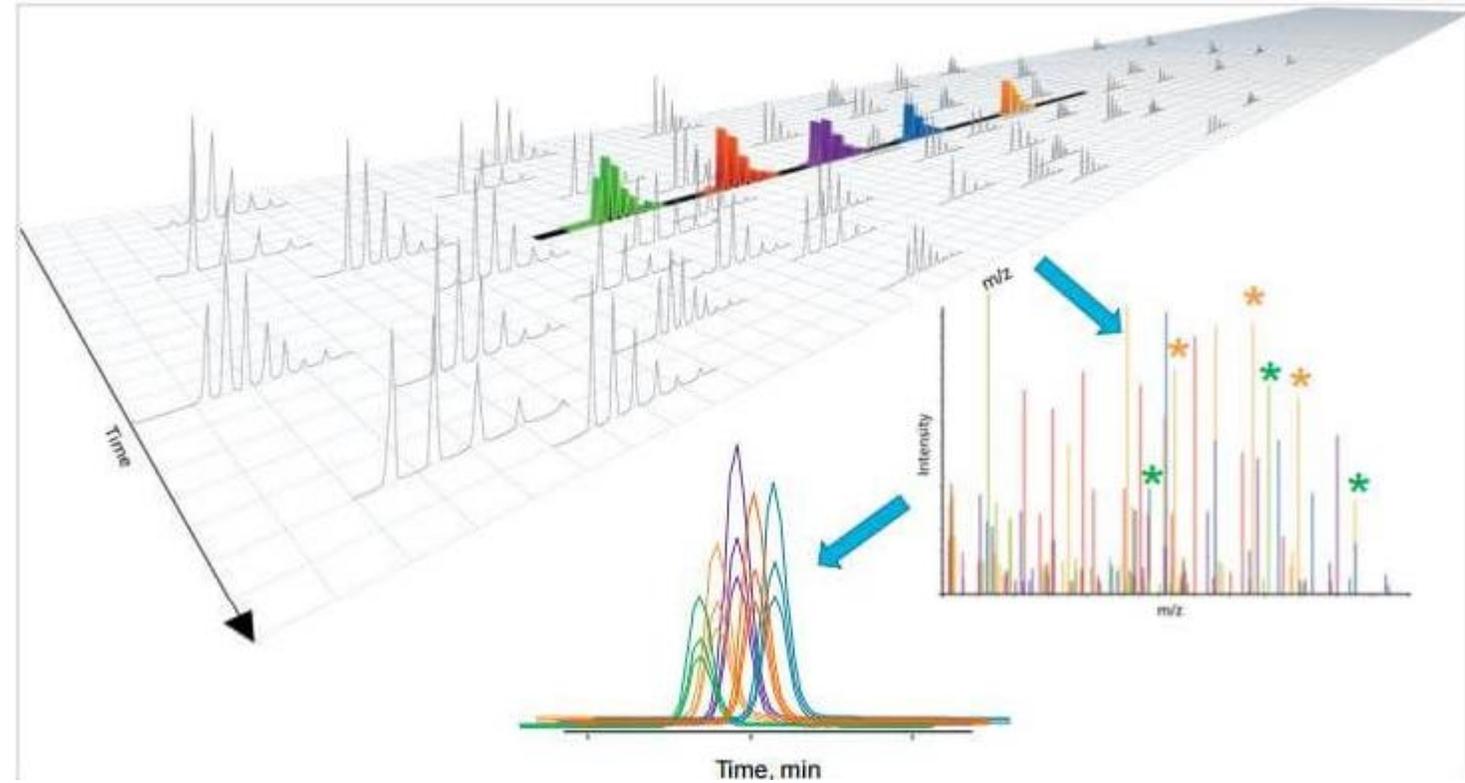
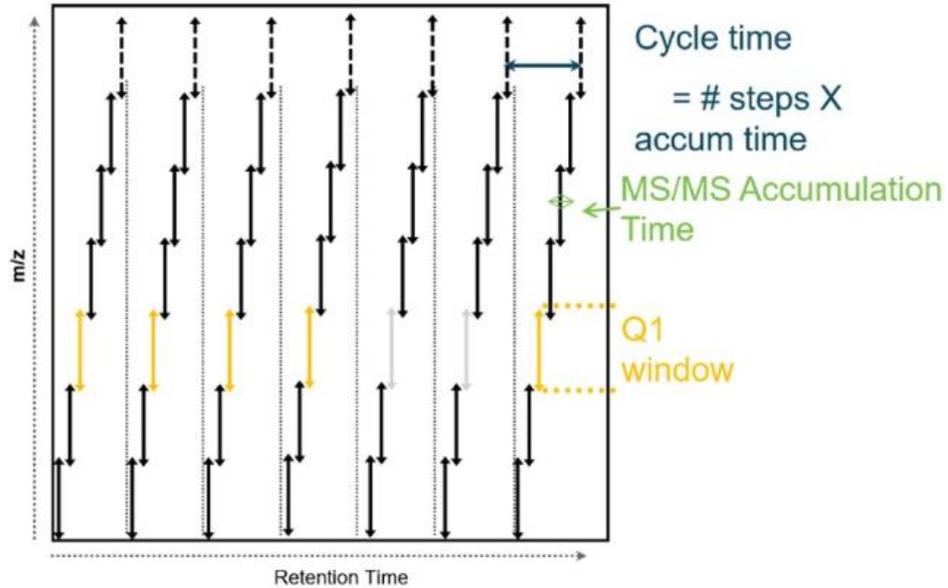
TWATH (Sciex), SONAR (Waters)

# DDA (data dependent acquisition)



DDAの問題 → フリッカーサーイオンの取りこぼし

# DIA (data independent acquisition)



設定した  $m/z$  幅のイオンをまとめてMS/MS (フラグメントイオン分析)

混ざった状態のプリカーサーイオン → 混ざった状態のフラグメントイオン

両者の紐づけが必要 → クロマトグラムデコンボリューション

# 参考資料

- マススペクトロメトリーってなあに（質量分析学会編、国際文献印刷社）
- これならわかるマススペクトロメトリー（化学同人）
- マススペクトロメトリー関連用語集  
（web版：<http://www.mssj/index-jp.html>）
- 現代質量分析学（化学同人）
- 液クロ龍、彪、犬、武、文の巻（液クロ研究懇談会編、丸善）
- 液クロを上手につかうコツ（液クロ研究懇談会編、丸善）
- 液クロ実験 How to マニュアル（液クロ研究懇談会編、みみずく舎）
- LC/MS, LC/MS/MSの基礎と応用（液クロ研究懇談会編、オーム社）
- LC/MS, LC/MS/MSのメンテナンスとトラブル解決（液クロ研究懇談会編、オーム社）

★出来るだけ、やさしく、詳しく解説してます！

# LC/MS 定量分析入門 (2021)

## 著者

博士(工学) 高橋 豊 著

エムエス・ソリューションズ(株) 代表取締役、(株)プレッパーズ 代表取締役社長  
横浜市立大学非常勤講師、浜松医科大学非常勤研究員

### ■ 主経歴

- ・ 1990年 日本電子(株) 入社  
応用研究センター研究員；LC/MS を用いた応用研究、LC-MS 装置制御ソフトウェアの開発、  
ナノESI イオン源の開発、マイクロチップと分析機器を組み合わせたデバイス開発
- ・ 2010年 日本電子(株) 退社、エムエス・ソリューションズ(株) 設立、代表取締役
- ・ 2019年 浜松医科大学発ベンチャー 株式会社プレッパーズ設立、代表取締役社長

### ■ 専門・得意分野

質量分析全般、LC/MS およびLC/MS/MS による定性・定量分析、マススペクトル解析

### ■ 本テーマ関連の学会・協会・団体等

日本質量分析学会、液体クロマトグラフィー研究懇談会

【早期割引にて申込受付中】

29,700円 (税込 (消費税10%)) 2021年6月22日のお申込まで！

## 発刊・体裁・価格

発刊 2021年6月予定 定価 35,200円 (税込 (消費税10%))  
体裁 B5判 約160ページ ISBN 978-4-86502-215-5 [詳細、申込方法はこちらを参照](#)

