

高速液体クロマトグラフ質量分析計

Quadrupole Time-of-Flight Liquid Chromatograph Mass Spectrometer

# LCMS-9030



# Effortless Performance

LCMS-9030は、LCMS-8000シリーズで培われた技術と  
島津TOFの新技术が融合して誕生した  
「Q-TOF型質量分析計」です。

シンプルな操作だけで、精度、感度、分解能を  
兼ね備えた納得のデータが容易に得られます。

LCMS™シリーズにLCMS-9030が加わり、  
島津LCMSの新たな挑戦が始まります。



最新のテクノロジーをムービーでご紹介します。



Quadrupole Time-of-Flight  
Liquid Chromatograph Mass Spectrometer

# LCMS-9030

**Greater** Accuracy

**Better** Sensitivity

**Higher** Resolution

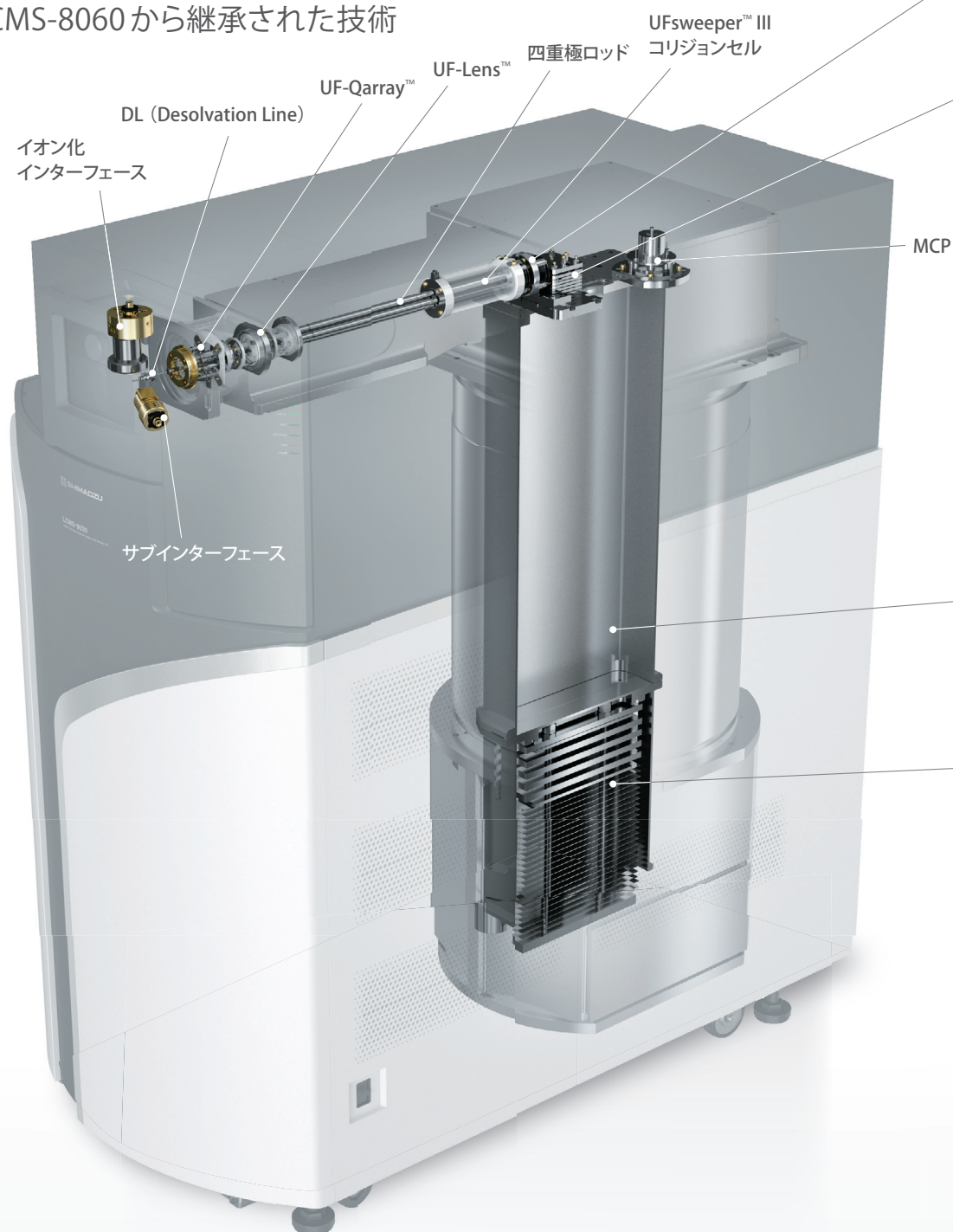


# LCMS-9030のキーテクノロジー

イオン導入部からイオン分離部までは主にLCMS-8060から継承した技術が搭載されています。明るいイオン光学系と高いイオン収束力で、イオンを効率よくTOF部へと導きます。TOF部では、優れた質量精度および高感度と高分解能の両立を実現するために、UFgratingとiRefTOFといった島津独自の特許技術が使われています。“UFgrating”とは、非常に強い強度を持つ当社が独自開発した格子状電極です。イオン熱運動の質量精度への悪影響を抑えるために、

直交加速部からのイオン射出に用いる電極です。従来の電極と異なり、その機械的強度の高さから、従来より高い引出電界を印加しても電極の変形がなく、イオンを正確にフライトチューブ (UF-FlightTube) へと誘導することが可能です。iRefTOFでは、イオン反射時の軌道の発散や飛行時間の広がり を最大限に抑制しつつ、エネルギー収束性を従来よりも高める理想的な電位分布を、独自の電極形状により実現しています。

## ▶▶ LCMS-8060から継承された技術





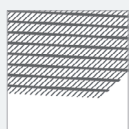
## ▶▶ TOFの新技术

### UFaccumulation™ (特許 JP6237907)

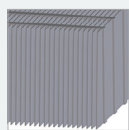
コリジョンセルにイオンを蓄積し、コリジョンセルからのイオン排出と直交加速部からのイオン射出を同期させることで、イオンの利用効率を向上させます。

### UFgrating™ (特許 JP5772967)

島津独自の高精度加工技術で製造された、直交加速部からのイオン射出に用いる高強度微細格子電極で、高感度と高質量精度を実現します。さらに、強電場でのイオン射出によりターンアラウンドタイムを抑制させることで、高分解能を実現しています。



従来品は、加工技術の問題から、薄いメッシュ構造となっているため、機械的強度が低い



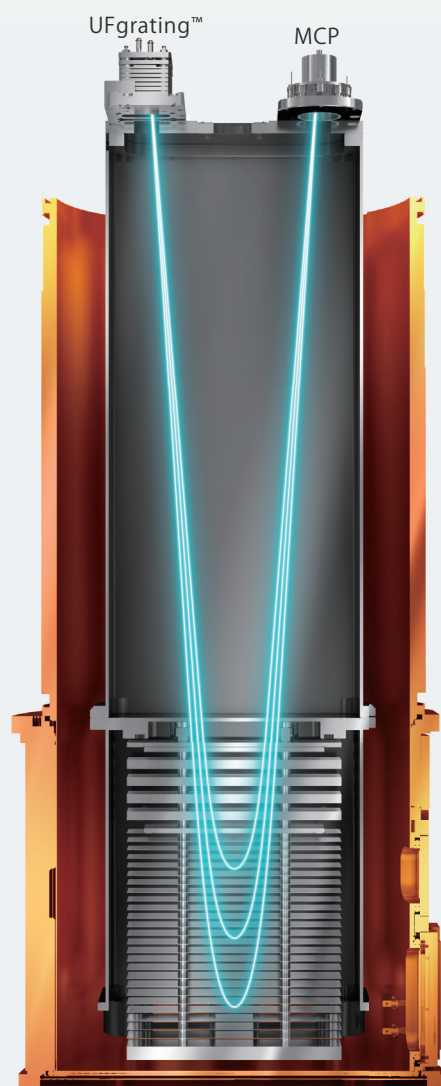
UFgratingは厚さ2mmの格子状の構造なので、機械的強度が高く、強電場の印加が可能

### UF-FlightTube™ (特許出願中)

ヒーター・温度センサーの数・配置の最適化とロバストな制御方式での高精度温度コントロールにより、高い質量精度を実現します。

### iRefTOF™ (特許 JP5629928、5862791)

電位分布を最適化した理想的なリフレクトロン (ideal Reflectron) で、高分解能と高感度の両立を実現します。



iRefTOF™

## スリムなフロアスタンディング型

シンプルでコンパクトなデザインで、省スペース化を実現しました。



**LCMS-9030**

Quadrupole Time-of-Flight Liquid Chromatograph Mass Spectrometer

# 精密質量測定の日常化を可能にするテクノロジー

## 高精度温度コントロールシステム (特許出願中)

HRAM: High Resolution Accurate Mass Spectrometer (高分解能精密質量分析装置) として最も重要な役割を担っているのは「高精度温度コントロールシステム」です。

設置環境や装置内温度変化のような外的要因による精密質量変化を抑制するため、フライトチューブにはヒーター、温度センサーを適切に配置し、精密な温度コントロールを実現しています。ヒーターと温度センサーの位置関係を最適化し堅牢性の高い温度コントロールシステムを開発しました。また、フライトチューブ制御用の電源系も温度コントロールしており高い質量安定性を実現しています。

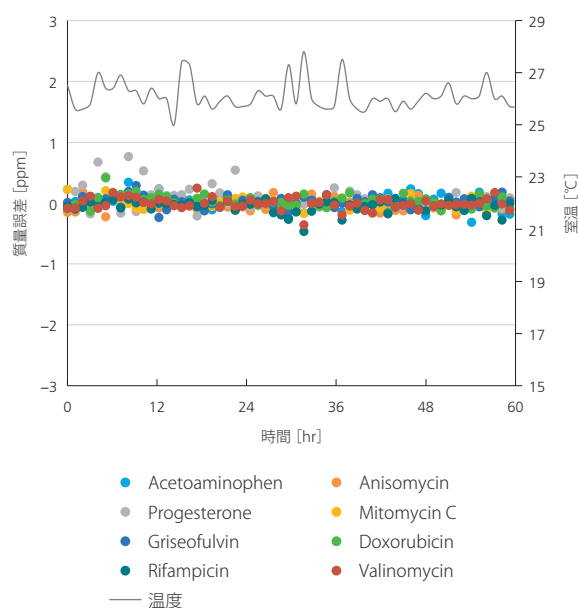


## 室温変化に対する安定した質量精度

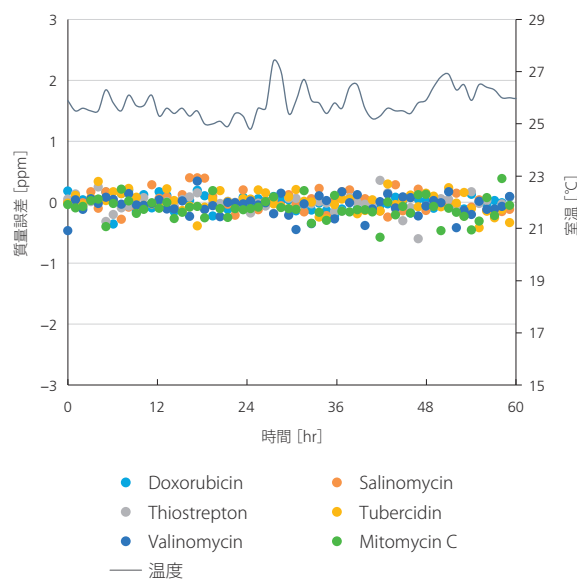
通常の実験環境において室温の変動は避けることができません。高精度に管理された温度コントロールシステムによって室温変化の影響を抑え、幅広い分子量範囲で長時間にわたって安定した質量精度が得ることが可能です。これにより、質量校正に費やす時間と労力を大幅に削減することができます。

分子量が150から1700 Daの各種抗生物質の標準品を60時間連続分析して、理論値との質量誤差をプロットしました。分析は通常の実験環境で行い、4℃の室温変化が見られました。この間、データを質量補正することなく、すべてのサンプルの精密質量が理論値から±1 ppm以内という高い精度のデータが得られました。

### ポジティブイオンモード

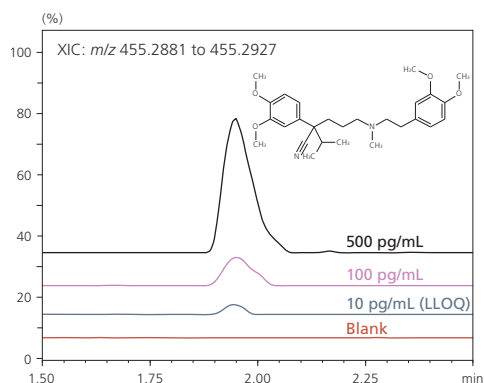


### ネガティブイオンモード



## 低濃度域においても信頼できる質量精度

高感度定量の信頼性を高めるためには、低濃度域における安定した質量精度を維持することが重要です。不整脈治療薬ベラパミルの測定例を以下に示します。LOQ付近の低濃度でも質量誤差 1 ppm 未満という良好な質量精度が得られました。また、LLOQ である 10 pg/mL で面積値再現性が 5.31% (n=3)、正確性が 100.5% であり、良好な定量結果を示しま

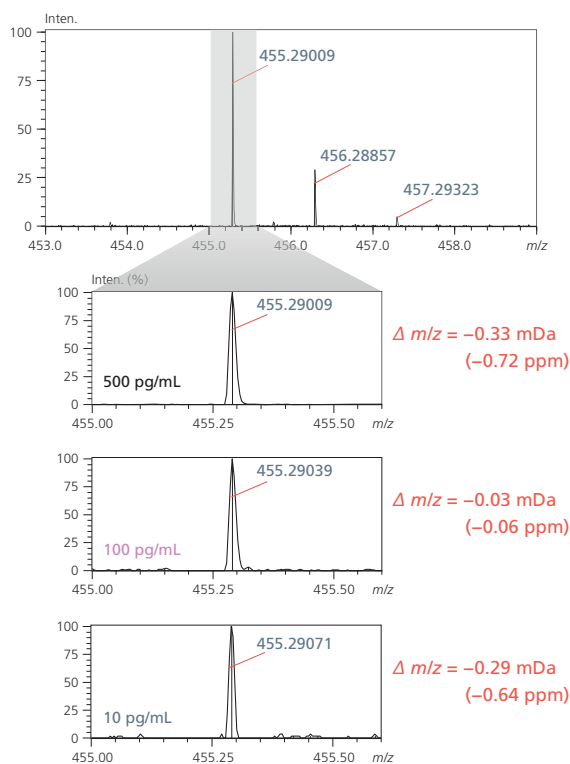


ベラパミル ( $C_{27}H_{38}N_2O_4$ , MW: 454.602) のマスクロマトグラム

ベラパミルの定量結果

| 設定濃度 (pg/mL) | 算出濃度 (pg/mL) | 面積値再現性 (% , n=3) | 正確性 (% , n=3) |
|--------------|--------------|------------------|---------------|
| 500          | 523.3        | 1.93             | 104.67        |
| 100          | 96.3         | 3.78             | 96.50         |
| 10 (LLOQ)    | 10.3         | 5.31             | 100.50        |

した。このように低濃度域においても高い質量精度を保つことにより、幅広い濃度において信頼性の高い定量分析を行うことが可能です。

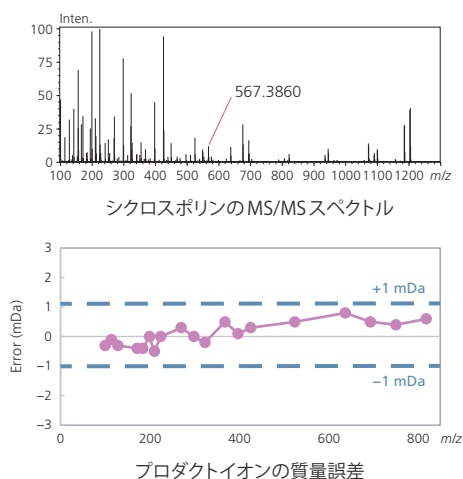
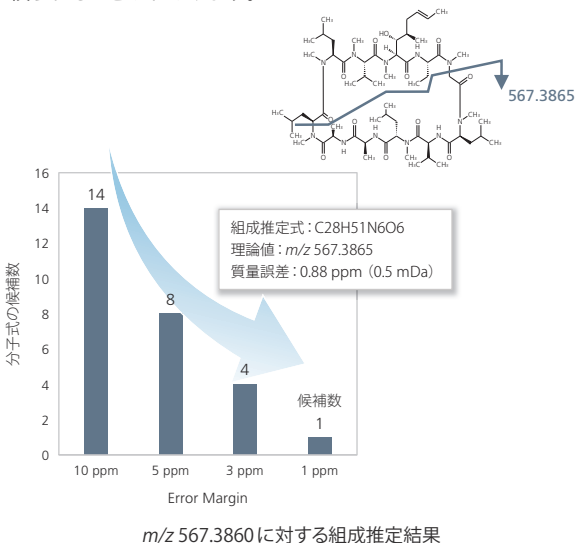


各濃度のマスクロマトグラム

## MS/MS分析においても卓越した質量精度

化合物同定において、MS/MSスペクトルは非常に重要な情報であり、質量精度などを含めた情報の質が問われます。LCMS-9030は、MS/MS分析においても高感度と高い質量精度の両立を実現しました。これらにより、複雑性の高い化合物に対しても、精度の高い構造解析と確度の高い化合物同定を可能にします。環状ペプ

チドであるシクロスポリンのMS/MSスペクトルと、その構造式を示しました。主要なMS/MSフラグメントが、質量誤差 1 mDa 以下の精度で一致しました。m/z 567.3860 の組成推定結果から、質量誤差が少ないほど推定される組成式の数



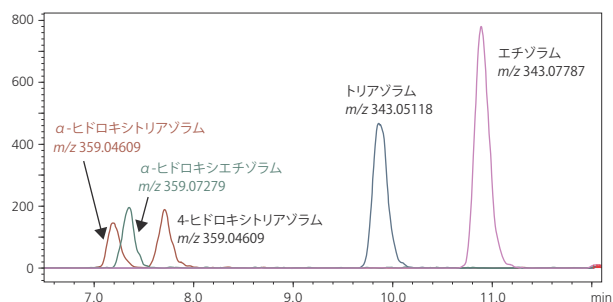
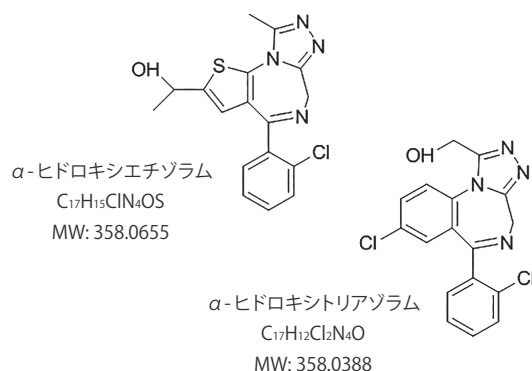
プロダクトイオンの質量誤差

## 信頼性の高い同定と定量 ― 向精神薬の分析 ―

エチゾラムおよびトリアゾラムは抗不安薬・睡眠薬として使用頻度の多い向精神薬です。これらの薬物の未変化体および代謝物は類似構造を有する同重体化合物です。特に、それぞれの代謝物である $\alpha$ -ヒドロキシエチゾラムと $\alpha$ -ヒドロキシトリアゾラムは、液体クロマトグラフィー（LC）による分離が非常に難しく、また分子量がほぼ同じであるため、低分解能の質量分析装置では両者を識別して検出することは困難です。一方、飛行時間型質量分析計は高分解能であ

ることから質量分離で識別することが可能です。そこで、LCMS-9030を用いてエチゾラム、 $\alpha$ -ヒドロキシエチゾラム、トリアゾラム、 $\alpha$ -ヒドロキシトリアゾラム、4-ヒドロキシトリアゾラムの一斉分析を行いました。

下図は、全血に10 ng/mLを添加したエチゾラム、トリアゾラムとその代謝物のマスククロマトグラムです。LCで分離困難であった $\alpha$ -ヒドロキシエチゾラムと $\alpha$ -ヒドロキシトリアゾラムを含め、全成分を検出することができました。



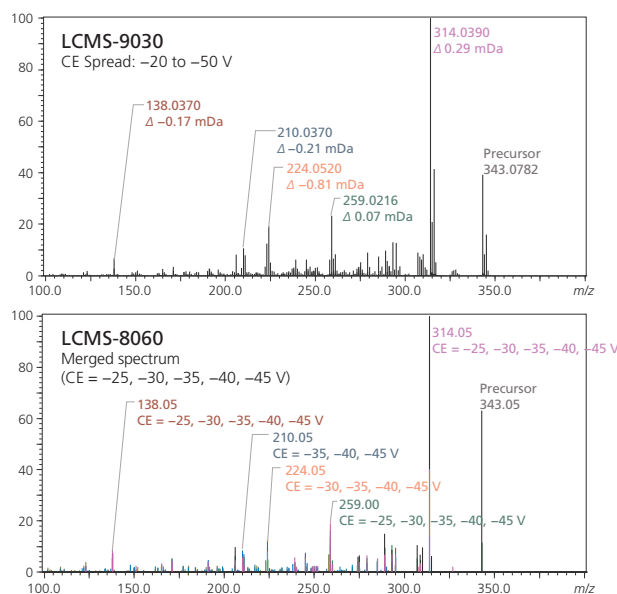
全血に10 ng/mLを添加したエチゾラム、トリアゾラムとその代謝物のマスククロマトグラム

## LCMS-8060のDNAを引き継いだスペクトルパターン

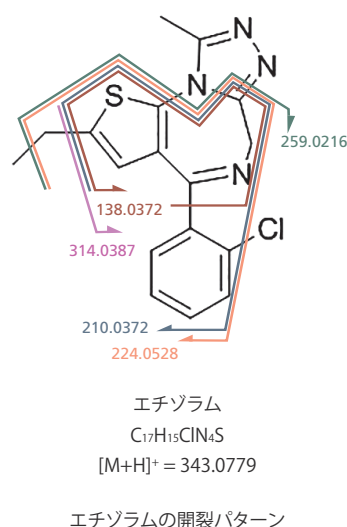
先に述べたように、LCMS-9030はLCMS-8060と同様のHeated ESIを採用し、イオン導入部からイオン分離部まではLCMS-8060と共通の技術を搭載しています。したがって、コリジョンエネルギー（CE）やイオン化部の温度などLCMS-8060と共通のパラメータ値をそのままLCMS-9030で使用することができます。

下図はLCMS-9030とLCMS-8060で測定したエチゾラムのプロダクトイオンスペクトルです。LCMS-9030にはCEの値を指定した範囲内で連続的に変化させてスペクトルを取得する

「CE Spread」という機能が搭載されています。LCMS-9030のデータはCE Spread機能を用いて、CEを-20から-50 Vまで変化させて得られたものです。一方、LCMS-8060のスペクトルは、CEが-25, -30, -35, -40, -45 Vのときの各プロダクトイオンスペクトルを合算した、いわゆるマージスペクトル（merged spectrum）です。両者を比較すると、スペクトルパターンがよく一致しており、LCMS-9030とLCMS-8060で分析条件の互換性が高いことを示しています。



エチゾラムのプロダクトイオンスペクトル



謝辞

本分析は名古屋大学大学院医学系研究科 法医・生命倫理学 財津 桂 准教授のご協力のもと行いました。



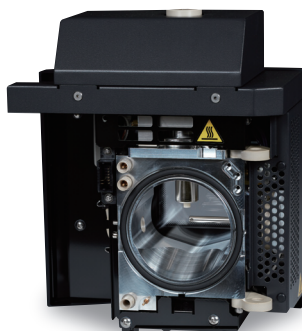
# シンプル設計のイオン化ユニット

LCMS-9030は、標準装備のESIイオン化ユニットに加えて、APCIとDUISイオン化ユニットをそれぞれオプションとして取り揃えています。ESIイオン化ユニットとDUISイオン化ユニットのプローブは、LCMS-8060と同じくHeated ESIを採用しています。

ESI (標準)



APCI (オプション)



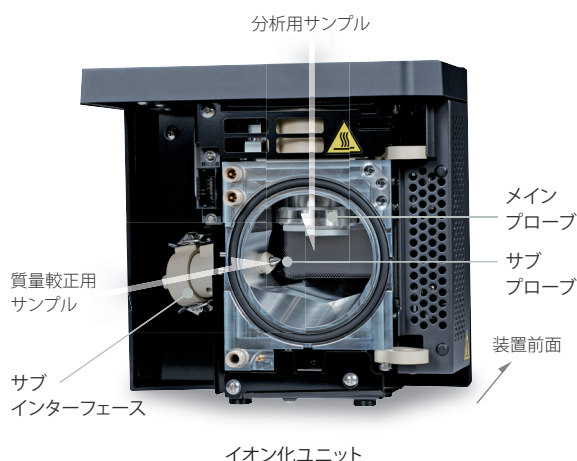
DUIS™ (オプション)

エレクトロスプレーイオン化 (ESI) と大気圧イオン化 (APCI) を同時に行うイオンソース



## Calibrant Delivery System (CDS)

LCMS-9030では、質量校正用サンプルをメインプローブとは別のサブプローブから導入することができます。サブプローブはオプションであるサブインターフェースに搭載されています。サブインターフェースは各イオン化ユニット (ESI/APCI/DUIS) にワンタッチで装着することができます。分析用と質量校正用の2つのプローブを備えることで、流路の汚染を気にすることなく、分析と質量校正を行うことが可能となります。



## マイクロ流量用イオン化ユニット Micro-ESI 9030

Micro-ESI 9030は、マイクロ流量対応の液体クロマトグラフ質量分析計システム Nexera Mikros用イオン化ユニットです。試料導入部に対するプローブ角度をマイクロ流量向けに最適化した結果、イオン化効率、イオン取り込み効率が向上し、高感度化を実現しました。また、余分な溶媒は除去されるため、汚れによる影響が少なく安定した分析が可能です。さらに、ワンタッチで分析カラムとLCMS-9030を直結できるUF-Link™により、サンプル拡散による感度ロスを最小限にしました。

Nexera Mikros & Micro-ESI 9030システムにより、セミマイクロLCMSシステムからの高感度化やナノLCMSシステムからの分析の短時間化の実現が可能となります。



Nexera Mikros™ & Micro-ESI 9030システム

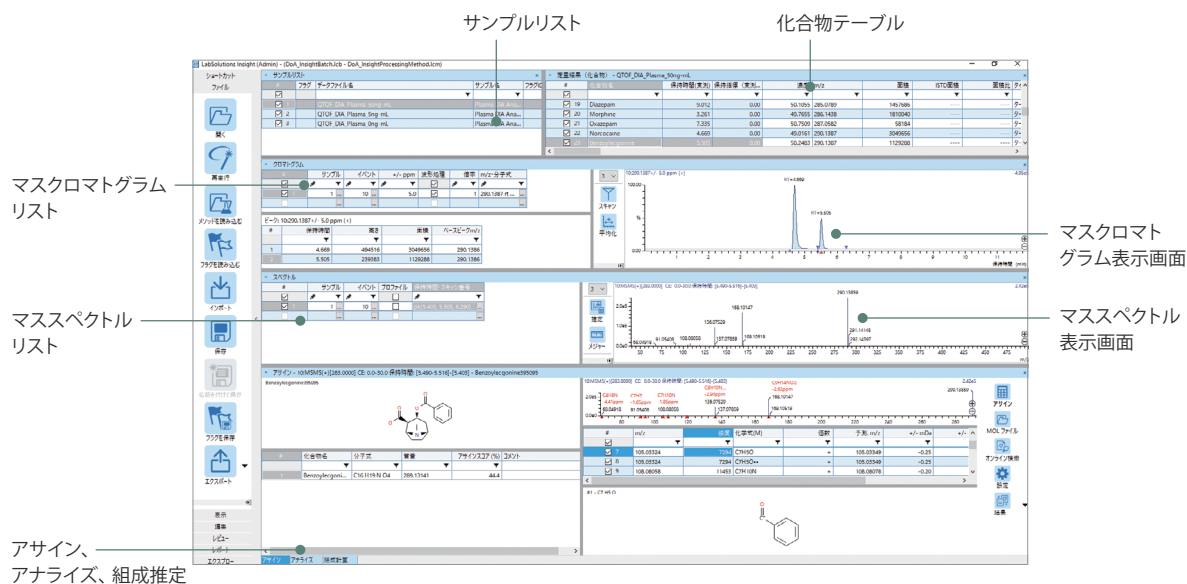
LCMS-9030

Quadrupole Time-of-Flight Liquid Chromatograph Mass Spectrometer

# LabSolutions Insight Explore™

## 定性解析から定量解析までをサポートするソフトウェア

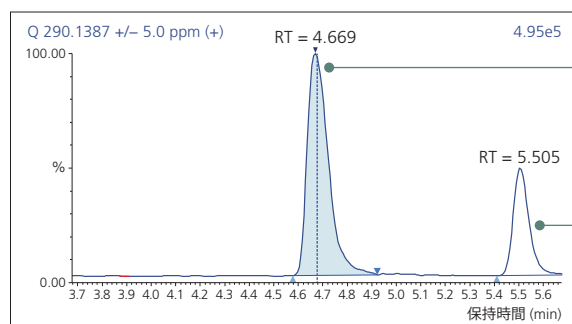
LabSolutions Insight Explorerでは、多検体の定量解析処理に加えて高分解能・高質量精度質量分析計データを用いた精度の高いライブラリ検索、構造解析、組成推定、多価イオン解析が可能です。



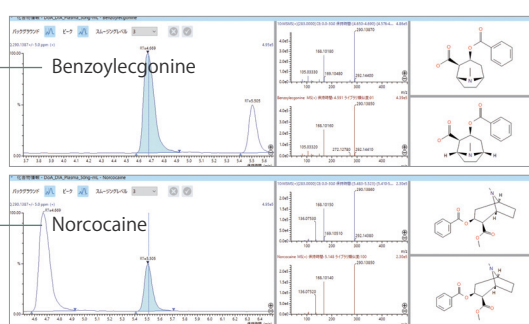
## 構造解析機能“アサイン”

分子式が同じ化合物は、高質量精度質量分析計においてもマスクロマトグラムピークで同定することはできません。ライブラリ検索機能に加えて、構造解析機能“アサイン”を用いれば、各化合物をより精度高く同定することが可能です。以下は、分子式“C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>NO<sub>4</sub>” ( $m/z$ : 290.1387) が同じ化合物 Benzoylecgonine と Norcocaine の解析例です。

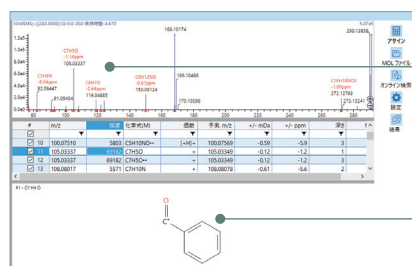
マスクロマトグラム ( $m/z$ : 290.1387)



ライブラリ検索結果



Benzoylecgonine の構造解析結果



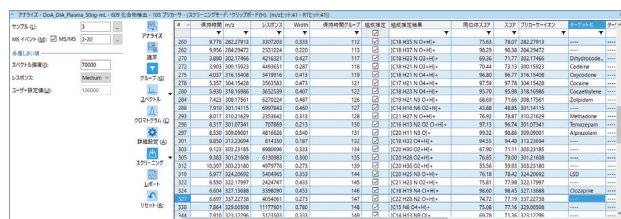
推定されるMS/MSフラグメントの  $m/z$

推定されるMS/MSフラグメントの構造

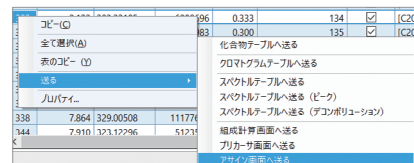
## ■ 化合物検出機能“アナライズ”

化合物検出機能“アナライズ”を使えば、精密質量データから未知化合物の組成を推定し分子式、構造式を検索することが可能です。

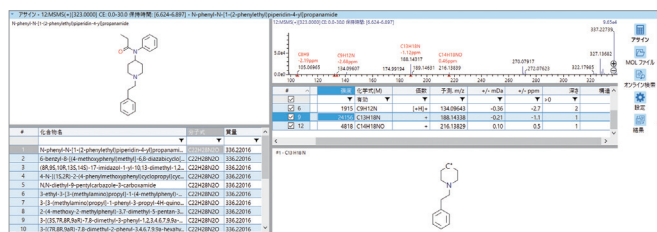
## 化合物候補の検索



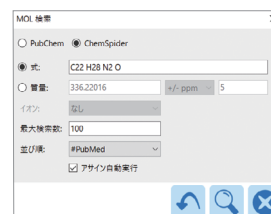
## 未知化合物の絞り込み



## 検索結果をアサインで解析

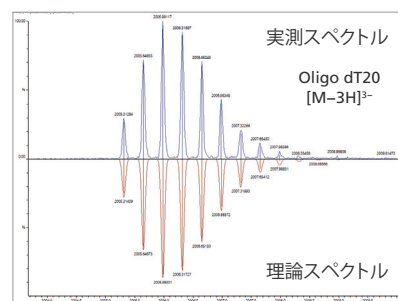
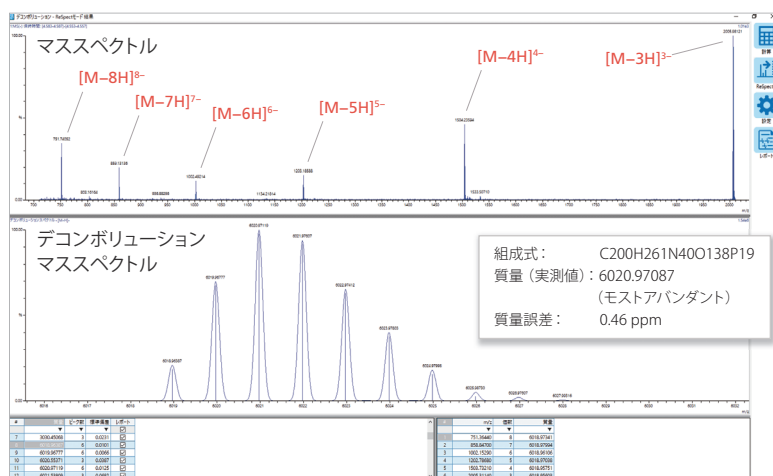


PubChem<sup>®</sup>、ChemSpider に  
よる検索



## 多価イオン解析（デコンボリューション）

LabSolutions Insight Explore CSD (オプション) には、Positive Probability Ltd. の多価イオン解析アルゴリズム “ReSpec<sup>™</sup>” が搭載されています。核酸医薬や抗体医薬のような分子量が大きいオリゴヌクレオチド、タンパク質の多価イオン解析による分子量推定に有用です。



### 実測スペクトルと理論スペクトルの比較

### オリゴヌクレオチド (Oligo dT20) の解析例



## Ai Support (保守契約) のご紹介

- ご加入装置にトラブルが発生した際には、優先的な対応を行います。  
また、定期点検時に装置状態を把握しているため、トラブル対処の処置・診断を迅速に行います。
- 定期点検により、機器が正常に稼働しているかどうかの診断を行い、的確な整備によりトラブルを未然に防ぎ装置稼働率を向上させます。
- 定額料金に点検費用・修理費用が含まれていますので、保守費用の予算化が容易に行えます。  
製品ライフサイクルにわたり、計画的に装置維持管理費を予算化できます。

### ■保守プランの概要

安心のオンコール修理を希望されるお客様へ

- プラチナ: 定期点検、整備交換部品 (Complete)、オンコール修理作業費、修理部品 (消耗部品を除く) のすべてを含んだ充実のサポートプランです。  
特別な場合を除き年間Ai Support料金以外の費用は発生しません。
- ホワイト: 定期点検、整備交換部品 (Value)、オンコール修理作業費を含んだベーシックプランです。
- シルバー: 定期点検、オンコール修理作業費をセットにした部品費を含まないプランです。

| プラン内容 |                                  | プラン名 | プラチナ        | ホワイト | シルバー |
|-------|----------------------------------|------|-------------|------|------|
| 点検    | 定期点検 (年1回)                       |      | ○           | ○    | ○    |
|       | 整備交換部品 (Value <sup>※1</sup> )    |      | Completeに含む | ○    | —    |
|       | 整備交換部品 (Complete <sup>※2</sup> ) |      | ○           | —    | —    |
| 修理    | オンコール修理                          |      | ○           | ○    | ○    |
|       | 修理交換部品 <sup>※3</sup>             |      | ○           | —    | —    |
|       | 消耗品                              |      | —           | —    | —    |
| その他   | 交通費                              |      | ○           | ○    | ○    |

※1 ご契約で定められた必要最低限の整備交換部品を交換します。ご契約以外の部品交換が必要となった場合、別途費用を申し受けます。

※2 定期点検時に上記Value部品に加え、フィールドエンジニアが必要と判断したすべての部品を交換します。

※3 オンコール修理訪問で復旧に使用した部品費を含みます (消耗部品は別途費用を申し受けます)。

詳細は、(株)島津アクセスへお問合せください。 <https://www.sac.shimadzu.co.jp/>  
本サービスの内容、料金は予告なく改定される場合がございます。予めご了承ください。

LCMS、UF-Qarray、UF-Lens、UFSweeper、UFaccumulation、UFgrating、UF-FlightTube、iRefTOF、DUIS、UF-Link、Nexera Mikros、CTO-Mikros、LC-MikrosおよびLabSolutions Insight Explorerは、株式会社島津製作所の商標です。  
ReSpectは、Positive Probability Limitedの商標です。  
PubChemは、The National Library of Medicineの登録商標です。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。  
なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。  
本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証を受けておりません。  
治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。  
トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。  
外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

# 株式会社 島津製作所

分析計測事業部 604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

東京支社 101-8448 東京都千代田区神田錦町1丁目3  
(03) 3219-(官公庁担当) 5631・(大学担当) 5616・(会社担当) 5622  
関西支社 530-0012 大阪市北区芝田1丁目1-4 阪急ターミナルビル14階  
(06) 6373-(官公庁・大学担当) 6541・(会社担当) 6556  
札幌支店 060-0807 札幌市北区北七条西2丁目8-1 札幌北ビル9階 (011) 700-6605  
東北支店 980-0021 仙台市青葉区中央2丁目9-27 プライムスクエア広瀬通12階 (022) 221-6231  
郡山営業所 963-8877 郡山市堂前町6-7 郡山フコク生命ビル2階 (024) 939-3790  
つくば支店 305-0031 つくば市吾妻3丁目17-1  
(029) 851-(官公庁・大学担当) 8511・(会社担当) 8515  
北関東支店 330-0843 さいたま市大宮区吉敷町1-41 明治安田生命大宮吉敷ビル8階  
(048) 646-(官公庁・大学担当) 0095・(会社担当) 0081  
横浜支店 220-0004 横浜西区北幸2丁目8-29 東武横浜第3ビル7階  
(045) 311-(官公庁・大学担当) 4106・(会社担当) 4615  
静岡支店 422-8062 静岡市駿河区稲川1丁目1-1 伊伝静岡駅前ビル2階 (054) 285-0124

名古屋支店 450-0001 名古屋市中村区那古野1丁目47-1 名古屋国際センタービル19階  
(052) 565-(官公庁・大学担当) 7521・(会社担当) 7531  
京都支店 604-8445 京都市中京区西ノ京徳大寺町1  
(075) 823-(官公庁・大学担当) 1604・(会社担当) 1603  
神戸支店 650-0033 神戸市中央区江戸町9-3 栄光ビル9階 (078) 331-9665  
岡山営業所 700-0826 岡山市北区磨屋町3-10 岡山ニューシティビル6階 (086) 221-2511  
四国支店 760-0017 高松市番町1丁目6-1 高松NKビル9階 (087) 823-6623  
広島支店 732-0057 広島市東区二葉の里3丁目5-7 GRANODE広島5階 (082) 236-9652  
九州支店 812-0039 福岡市博多区冷泉町4-20 島津博多ビル4階  
(092) 283-(官公庁・大学担当) 3332・(会社担当) 3334

島津コールセンター (操作・分析に関する電話相談窓口)  0120-131691  
IP電話等: (075) 813-1691

<https://www.an.shimadzu.co.jp/>