

Solutions for Innovation

JMS-Q1600GC UltraQuad™SQ-Zeta



JEOL Ltd. 日本電子株式会社

「**Zeta ゼータ」** 第 6 世代のハイエンド GC-QMS ついに登場

日本電子の新世代ガスクロマトグラフ四重極質量分析計 (GC-QMS) システム JMS-Q1600GC UltraQuad™ SQ-Zeta は、長年培ってきた QMS 技術を結集させた 第 6 世代のハイエンド GC-QMS です。

環境、水質、農薬分析といった定量分析から、

材料、におい分析といった定性分析まで

幅広い測定・分析二一ズに対応した究極の高性能・汎用型 GC-MS です。



JEOL製 四重極質量分析計の系譜



JMS-K9

- ・第1世代の JEOL 製 GC-QMS
- · 大型双曲電極、大型 TMP 採用
- · Novaspec ソフトウェア





JMS-Q1000GC

- ・クラス最高水準の SCAN 感度実現
- · Escrime™ ソフトウェア
- ・高濃度試料分析 日イオン源





JMS-Q1000GC MkII

- ・更なる SCAN 感度向上
- · JEOL 製ヘッドスペースサンプラー対応





JMS-Q1050GC

- ・フィラメント長期耐久性
- ・デュアルフィラメント搭載
- ・光イオン化法





JMS-Q1500GC

- ・新設計制御回路搭載と MSPRIMO™ ソフトウェア
- ・Escrime™ ソフトウェアへの定性 / 定量解析の統合
- · Draw-in Lens 搭載



JEOL における質量分析計は、1963年に上市した JMS-01 の磁場セクター質量分析計に端を発しますが、1970年代には四重極質量分析計(Quadrupole MS: QMS)の基礎的な研究も盛んに行われてきました。1972年に大型四重極(双曲電極)を採用した高性能 GC-QMS、JMS-Q10を上市しました。その後、1989年に JMS-AM シリーズ Automass を上市し、本格的に QMS 市場へ参入しました。

2003 年には待望の JEOL 製 GC-QMS、JMS-K9 を市場導入しました。JMS-K9 は大型双曲電極、大型 TMP を採用しており、Automass のコンセプトを踏襲しつつ、最新回路技術や PC システムを搭載した装置です。2003 年以降、JMS-K9 をベースとしたシステムおよびハードウェアの改良を日々行なっており、今まで 5 世代の GC-QMS を市場導入してきました。

この度 JEOL では 6 世代目となる JMS-Q1600GC UltraQuad™ SQ-Zeta を新たに市場導入いたします。今まで培った匠の技術を踏襲し、さらに機能をバージョンアップさせた新世代 GC-QMS システム JMS-Q1600GC UltraQuad™ SQ-Zeta にご期待ください。

高性能を約束する 匠の質量分析技術が結集

JMS-Q1600GC UltraQuad™ SQ-Zeta ではクラス最大の大型双曲形四重極を搭載しています。 双曲形四重極はイオン許容量が大きいため、広いダイナミックレンジと 優れたイオン透過性による高感度という2つの特長を両立させます。



工具不要な イージーメンテナンス!

イオン源取り外しに工具は一切必要ありません。 従来機種同様、大きなイオン源フランジを採用しており、高いメンテナンス作業性を確保しています。



1. カバーを外します

2. フランジを外します



Draw-in Lens

- ・四重極出口からのイオンの拡散を抑制し、 ケミカルノイズを低減
- ・イオン再加速による感度向上

二次電子増倍管検出器

・大気による劣化に強い検出器を採用し、 高性能を長期維持

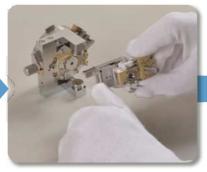
スプリットフローターボ分子ポンプ

- ・カラム交換・メンテナンス作業後の素早い真空立ち上げを可能に
- ・メガボア、パックドカラム使用可能
- ・最新の Low-Pressure GC (LPGC) カラムにも対応





3. ダイヤルを回して ストッパーを解除します



4. イオン源を外します



5. イオン源からチャンバーを外し、 洗浄します

UltraQuad™ SQ-Zeta の基本性能と多彩なハードウェアオプション

GC-MS に求められる基本性能を高い水準で達成! 多彩なハードウェアオプションにより様々なアプリケーションに対応します



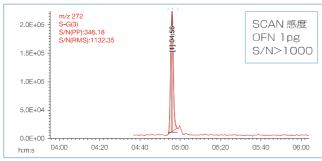
JEOL 独自の高精度双曲形四重極と Draw-in Lens で高感度を実現!

UltaraQuad™ SQ-Zeta では、検出器の前段に多重化した「Draw-in Lens」を搭載しています。「Draw-in Lens」は、ケミカルノイズ低減とイオン再加速による感度向上に寄与しています。

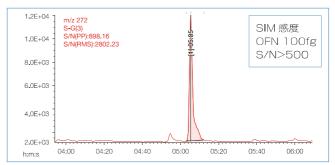
また装置制御システム(APU)を改良することにより、データ取得の効率とスピードの向上を達成しました。 UltraQuad™ SQ-Zeta はこれらの最新技術の採用により、検出感度と SCAN 速度が大幅に向上した最新の GC-QMS システムです。

高感度: SCAN OFN 1pg S/N>1000、SIM: OFN 100fg S/N>500

標準 EI イオン源は最高クラスの感度を有しており、微量定量分析、定性分析にご活用いただけます。

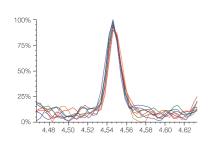


OFN: Octafluoronaphthalene



装置検出限界:IDL<5 fg

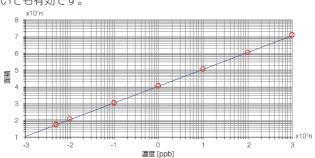
OFN 20 fg を SIM モードで連続8回測定し、得られた抽出イオンクロマトグラムの面積値とその再現性より装置検出下限を算出したところ、2.6fg を達成しました。



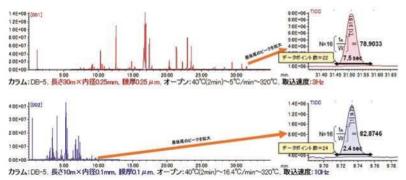
Injection No.	Peak Area
1	2,190
2	2,186
3	2,419
4	2,121
5	2,171
6	2,196
7	2,271
8	2.304

広いクロマトグラムダイナミックレンジ

OFN 0.005 ~ 1,000 pg を標準 EI イオン源の SIM モードで 測定したところ、検量線の決定係数は 0.999 以上を示す良好な 直線性が得られました。5 桁以上を有する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。



Fast GC への対応: SCAN 速度 22.222 u/sec



アロマオイルの TICC 及びクロマトグラムピーク比較 (上段:通常 GC 下段:Fast GC) Fast GC は、内径が細く、長さが短いカラムを使用して、高速昇温させることで、分離能力を維持したまま測定時間を短縮することが可能な手法です。 一方 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。

UltraQuad™ SQ-Zeta は SCAN 速度 22,222 u/sec のデータ取り込み速度を有しており、Fast GC 分析に対応可能です。

左の例は市販のアロマオイル 0.1 μL (neat) をスプリット (100:1) で、通常の GC 条件と Fast GC 条件のそれぞれで測定した結果です。 Fast GC により全体の測定時間を約 1/3 に短縮することができました。

ユニークな 2 つのオプション El イオン源で 拡がる分析ソリューション!

UltraQuad™ SQ-Zeta では 2 種類のオプション El イオン源が選択可能です。 高性能 El イオン源は UltraQuad™ SQ-Zeta で新たに搭載したイオン源です。高感度化により、今まで諦めていた分析・アプリケーションが可能になります。

高性能 El イオン源: Enhanced Performance Ion Source (EPIS) (オプション)、装置検出限界: IDL<1 fg

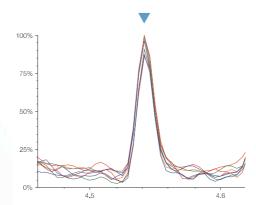
EPIS ではイオン源チャンバーを改良することで高感度化を達成しました。EPIS における装置検出限界は IDL<1 fg(OFN 5 fg 注入、8 回測定)です。業界最高レベルの感度は、

- 微量成分分析
- 濃縮作業の簡略化、試料導入量の低減 (汚染低減)
- SIM 定量から SCAN 定量への置き換え(測定条件簡便化、ノンターゲット分析可能)

といった様々なメリットを生み出します。

定量分析のみならず定性分析にも活用いただけるオプション EI イオン源です。





Peak Area
7,093
7,356
7,454
7,473
7,366
7,175
6,695
6,997

OFN 5 fgをSIMモードで連続8回測定し、得られた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、IDL 0.6 fgを達成しました。

高濃度試料分析 El イオン源 (オプション)、SCAN OFN 1pg S/N>20

本イオン源ではチャンバー開口部を広げることで、イオン源とレンズの汚染が標準イオン源よりも軽減しています。 また廃液中の VOC などの高濃度試料を希釈なしで測定しても、良好なデータが取得できます。 高濃度域までのダイナミックレンジ・直線性を持ち、再現性、耐久性も兼ね備えた、高濃度の試料測定に最適なイオン源です。



1.E+08						
1.E+07						
1.E+06					5	
Peak Area 1.E+05				5		
1.E+04						
1.E+03	5					
1.E+02	04	0.4			0 4	20 4000
U	.01	0.1	Am	ı 1 ount (ng)	0 10	00 1000

VOC 測定で使用される p-Bromofluorobenzene て	~ ′
300 ng まで直線性を維持	

Amount (ng)	Peak Area
0.01	828
0.1	8,190
1	74,607
10	759,032
100	10,052,036
300	29,281,767
相関係数	0.9998

特長あるソフトイオン化法を アプリケーションに応じて使い分け!

UltraQuad™ SQ-Zeta ではソフトイオン化法として光イオン化法(PI)と化学イオン化法(CI)が使用可能です。 また標準 EI イオン源では、イオン化電圧を $10\sim20~{
m eV}$ 程度に下げることでフラグメントイオン発生を抑制する Low-Energy EI 法も 可能です。

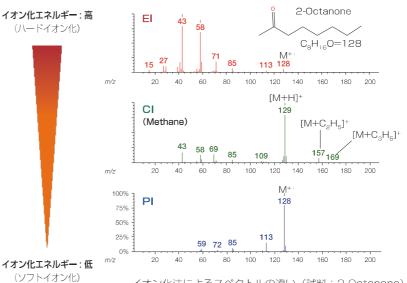


定性分析、定量分析に活用可能なソフトイオン化法

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。

UltraQuad™ SQ-Zeta では PI·CI· Low-Energy EI がソフトイオン化法として 使用でき、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する ことが可能です。

これらのソフトイオン化法は、 ライブラリーデータベース検索による定性分 析の確認作業や、選択性を活かした定量分析 への応用が可能です。



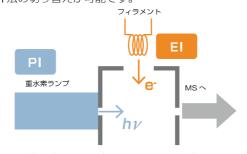
イオン化法によるスペクトルの違い(試料:2-Octanone)

Peak A

光イオン化法 EI/PI 共用イオン源(オプション)

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 用イオン源として使用できます。El フィラメントの ON/OFF、Pl 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。

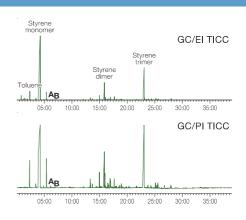
- ▶ イオン源交換不要
- ▶ 真空解除不要
- ▶ 試薬ガス不要
- ▶ 主に定性分析向け

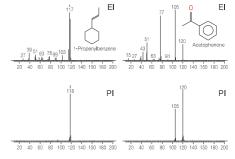


PI 使用時は ランプ: ON、 フィラメント: OFF EI 使用時は ランプ: OFF、フィラメント: ON

EI/PI 共用イオン源の概要図







Peak B

発泡スチロールの Pv/GC-MS 測定結果

紫外線を強く吸収する芳香族炭化水素は、PI 法で優先的に イオン化されるため、高感度に分子イオンを検出可能です。

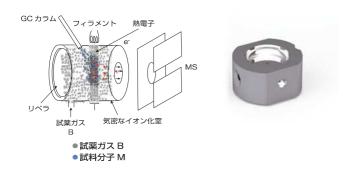
化学イオン化法 CI イオン源 (オプション)

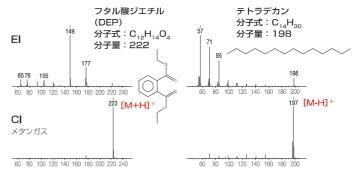
化学イオン化 (CI) 法では、試薬ガスと試料分子とのイオン分子反応によりプロトン付加分子を生成するイオン化法です。試薬ガスにはメタン、イソブタン、アンモニアなどが使用されます。

CI 法ではポジティブモードとネガティブモードでの測定が可能です。一般には、ポジティブモードは分子量確認などの定性分析に使用されます。ネガティブモードは、PCB などの含ハロゲン化合物の定量分析に使用されます。

特長

- ▶ 試薬ガス必要
- ▶ ポジティブモード ネガティブモードが可能





ポジティブモードで得られるイオン種の例

ポジティブモード:

- M + [B+H]⁺ → [M+H]⁺ + B (プロトン付加)
- M + [B+H]⁺ → [M+B+H]⁺ (反応イオン付加)
- M + [B+H]⁺ → [M-H]⁺ + [B+2H] (H-の引き抜き)

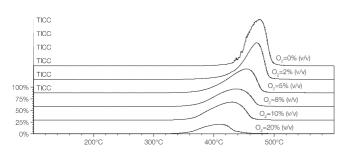
ネガティブモード:

- M + e⁻ → [M]⁻⁻(共鳴電子捕獲)
- M + e⁻ → [M-N]⁻ + N (解離性共鳴電子捕獲)

低真空用フィラメント (オプション)

JEOL では、酸素雰囲気下においても安定した EI 測定が可能な 低真空用フィラメントを開発しました。

これにより、合成プロセスと同様の酸素雰囲気下での TG 測定が可能です。



各酸素濃度で TG 測定したポリスチレンの TICC

各 TICC においてポリスチレンの分解によって生じた発生ガスのピークが観測されていますが、酸素濃度が増加するにつれてピークの発生温度が低くなっています。ポリスチレンの熱分解温度が酸素濃度によって変化することが分かります。

ダイレクト MS プローブ (オプション)

GC では難しい高沸点成分の測定はダイレクト MS プローブを用いた測定が有効です。

UltraQuad™ SQ-Zeta では 2 種類のダイレクト MS プローブ を選択できます。

試料の形態や物性、目的に応じてプローブを選択します。



直接導入プローブ /F (Direct Exposure Probe: DEP)

- ●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



直接導入プローブ /C (Direct Insertion Probe: DIP)

- 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

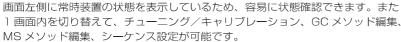
新感覚の制御ソフトウェア "MSPRIMO™"

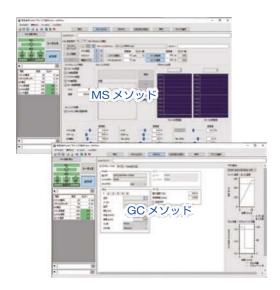


使いやすさを追求した ユーザーインターフェイス

MSPRIMO™ は、JMS-Q1500GC から採用された JEOL GC-QMS シリーズ制御ソフトウェアです。 従来のソフトウェアにおいて複数のウィンドウに分割されていた機能を 1 つのウィンドウに集約しており、直感的で分かりやすいインター フェイスとなっています。







測定、装置制御、解析作業との連携が可能な マルチファンクションシーケンス



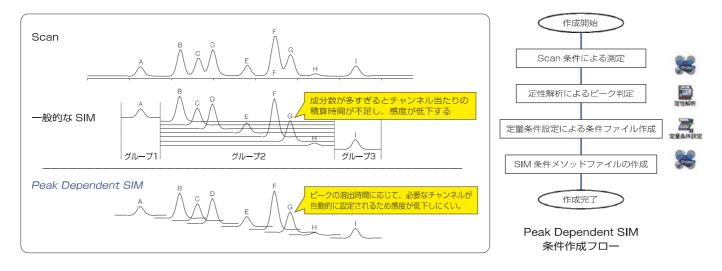


測定 (分析) のみならず、装置起動や停止な どもスケジューリング可能です。

MSPRIMO™は、測定、装置制御、解析作業指示が行える、マルチファンクションシーケンスを搭載しています。 作業開始を時間設定できるため、自由な作業スケジューリングが可能です。測定終了後の装置シャットダウン、連続測定の任意位置での チューニング、測定済みデータへの定量解析実施、など、日々の分析業務をサポートします。

自動 SIM 条件作成機能 Peak Dependent SIM で簡単・高感度な定量分析

今まで煩わしかった SIM グルーピング作業を行う必要はもうありません。 自動 SIM 条件作成機能 Peak Dependent SIM は最適な SIM グルーピングを自動で設定します。 誰でも簡単に最適化した SIM 条件で測定を行うことができます。 SIM 測定における 1 グループあたりのチャンネル数は 100、グループ数は 500 まで設定可能です。



Peak Dependent SIM (pd-SIM) による農薬分析アプリケーション: MSTips No. 295

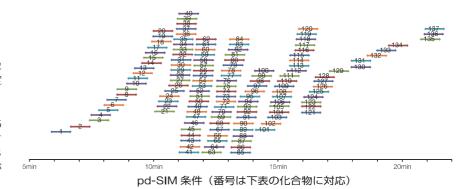
水道規制農薬の一斉分析に 関する検討

「水道水質基準水質管理目標設定項目」が対象 とする農薬類のうち 134 成分の pd-SIM 測定 例です。

多成分が対象のため、特に保持時間 10~15分の間は数多くの農薬成分が溶出していますが、pd-SIM を使用することで農薬成分に応じて必要なチャンネルを適切に設定することができました。

また pd-SIM の適切なチャンネル設定により、一般的な SIM と比べて感度向上する農薬成分が多数見られました。

もちろん pd-SIM においても測定結果は安定しており、農薬 5 ppb の変動係数(n=5)は10%以下の良好な再現性を示しました。



#	Name	Q-ion (m/z)	R.T. (min)	C.V. (%)	r	#	Name	Q-ion (m/z)	R.T. (min)	C.V. (%)	r	#	Name	Q-ion (m/z)	R.T. (min)	C.V. (%)	r
1	Dichlorvos	185	6.14	1.0	0.999	47	Fenitrothion	277	11.61	6.4	0.998	93	Uniconazole p	234	13.69	2.9	0.997
2	Dichlobenil	171	6.92	1.0	0.999	48	Bromacil	205	11.63	2.5	0.998	94	Fenthion oxon sulfone	294	13.74	4.8	0.998
3	Etridiazole	211	7.68	1.4	0.999	49	(e)-dimethylvinphos	295	11.68	2.2	0.999	95	Buprofezin	105	13.80	1.8	0,999
4	Trichlorfon	79	7.76	-	0.989	50	Malathion	127	11.73	4.6	0.999	96	Isoxathion	105	14.00	1.8	0.998
- 5	Chloroneb	191	8.06	2.2	0.999	51	Chlorpyrifos oxon	270	11.76	4.4	0.996	97	Cyproconazole	222	14.09	1.7	0.998
6	Isoprocarb	121	8.28	3.1	0.998	52	Esprocarb	91	11.76	1.4	0.999	98	(z)-pyriminobac-methyl	302	14.21	3.4	0.999
7	Molinate	126	8.39	1.3	0.999	53	Quinodamin	207	11.85	2.2	0.999	99	Fenthion sulfoxide	279	14.28	3.1	0.997
8	Fenobucarb	121	8.80	0.7	0.999	54	Metolachlor	162	11.87	1.8	0.999	100	Fenthion sulfone	310	14.36	2.7	0.999
9	Propoxur	110	8.81	1.4	0.999	55	Chlorpyrifos	197	11.89	2.6	0.999	101	Endosulfan β	195	14.40	3.7	0.999
10	Trifluralin	306	9.20	4.2	0.999	56	Cyanazine	225	11.91	5.5	0.999	102	Mepronil	119	14.64	1.3	0.998
11	Benfluralin	292	9.25	3.3	0.998	57	Thiobencarb	100	11.92	0.6	0.999	103	Chlornitrofen	317	14.88	5.3	0.998
12	Cadusafos	159	9.45	4.9	0.999	58	(z)-dimethylvinphos	295	11.92	2.5	0.998	104	Propiconazole-1	259	14.97	2.1	0.999
13	Pencycuron	125	9.51	2.2	0.999	59	Fenthion	278	11.95	1.8	0.999	105	Edifenphos	109	14.98	3.1	0.999
14	Dimethoate	125	9.80	5.6	0.998	60	Chlorthal-dimethyl	301	11.99	1.3	0.999	106	(e)-pyriminobac-methyl	302	15.01	2.1	0.999
15	Simazine	201	9.88	3.5	0.999	61	Isofenphos oxon	229	12.02	2.1	0.996	107	Propiconazole-2	259	15.08	1.9	0.999
16	Atrazine	200	9.95	3.2	0.999	62	Tetraconazole	336	12.03	1.6	0.999	108	Endosulfan sulfate	272	15.08	2.8	0.999
17	Diazinon oxon	137	10,03	2,3	0,997	63	Fthalide	243	12,24	3,2	0,999	109	Epn oxon	141	15,18	3,7	0,998
18	Cvanofos	243	10.20	1.4	0.999	64	Fosthiazate	195	12.35	5.4	0.997	110	Thenylchlor	127	15.29	1.3	0.999
19	Propyzamide	173	10,25	3,3	0,999	65	Pendimethalin	252	12,47	5.6	0.997	111	Tebuconazole	250	15,38	4.0	0,999
20	Diazinon	179	10.26	1.1	0.999	66	Cyprodinil	224	12.48	1.5	0.999	112	Pvributicarb	165	15.68	1.0	0.998
21	Pyroquilone	173	10,34	0.7	0.999	67	Dimethametryn	212	12,56	1.3	0.999	113	Iprodione	314	15.78	6.8	0,996
22	Chlorothalonil	266	10.43	2.7	0.999	68	Thiamethoxam	212	12.56	1.3	0.999	114	Pyridafenthion	340	15.78	1.6	0.998
23	Disulfoton	97	10,48	2.1	0.998	69	Isofenphos	213	12,63	3.4	0.999	115	Acetamiprid	152	15,79	7.2	0,999
24	Anthracene-d10	188	10,52		0.000	70	Methyl daimuron	107	12.75	10.8		116	Epn	157	15.99	3.9	0.998
25	Iprobenfos	91	10.73	2.0	0.998	71	Phenthoate	274	12.75	2.7	0,999	117	Piperophos	122	16.02	5.6	0.997
26	Tolclofos-methyl oxon,	249	10,90	1,8	0,999	72	Procymidone	283	12,83	0,9	0,999	118	Cumyluron	267	16,05	14,5	
27	Fenitrothion oxon	244	10.96		0.998	73	Captan	79	12.83	1.8		119	Chrysene-d12	240	16.09	1-4,0	0,000
28	Benfuresate	256	10.96	3,5	0.999	74	Triflumizole	278	12.84	5.3	0.998	120	Orvsastrobin	205	16,14	5.4	0.997
29	Dichlofenthion	279	10.98	0.9	0.999	75	Butamifos oxon	244	12.85	5.8	0.998	121	Anilofos	226	16.26	3.1	0.998
30	Propanil	161	11.00	3.7	0.999	76	Dimeniperate	119	12.86	1.5	0.999	122	Bifenox	341	16.27	8,6	0.997
31	Terbucarb	205	11.01	2.0	0.999	77	Methidathion	145	13.02	3.4	0.998	123	Indanofan	174	16.27	5.7	0.999
32	Metribuzin	198	11.07	2.2	0.999	78	Propaphos	220	13,04	3.8	0.998	124	Furametpyr	157	16,36	1,4	0.999
33	Malaoxon	127	11.08	1.5	0.999	79	Tetrachlorvinphos	329	13.12	2.4	0.999	125	Phosalone	182	16.59	2.0	0.999
34	Chlorpyrifos-methyl	286	11.09	1.5	0.999	80	Butachlor	176	13.17	2.4	0.999	126	Pyriproxyfen	136	16.74	1.5	0.997
35	Bromobutide	119	11.10		0.999	81	Padobutrazol	236	13.17	2.0	0.999	127	Cyhalofop-butyl	256	16.74	2.1	0.999
36	Alachlor	188	11.10	2.7	0.999	82	Butamifos	286	13,32	7,2	0.998	128	Mefenacet	192		3,0	0.999
	Simeconazole		11.21	1.1	0.999	83			13.36	1,2	0,998		Pyraclofos		16.82	2.3	0.998
37		121					9-bromoanthracene	256		0.7	0.000	129		360			
38	Tolclofos-methyl	265	11.23	1.4	0.999	84	Endosulfan a	195	13.37	6.7	0.999	130	Cafenstrole	100	18.28	2.4	0.998
39	Simetryn	213	11.25	1.2	0.999	85	Flutolanil	173	13.42	4.6	0.999	131	Etobenzanid	179	18.29	2.9	0.999
40	Ametrine	227	11.31	1.7	0.999	86	Napropamide	72	13.43	1.0	0.999	132	Boscalid	140	18.93	2.6	0.999
41	Metalaxyl	160	11.32	2.8	0.999	87	Metominostrobin	191	13.46	4.4	0.999	133	Etofenprox	163	19.32	3.2	0.999
42	Prometryn	241	11.36	4.8	0.999	88	Isoprothiolane	118	13,52	1.2	0.999	134	Thiacloprid	126	19.80	7.4	0.998
43	Cinmethylin	105	11,38	1.3	0.999	89	Isoxathion oxon	161	13,53	1.8	0.996	135	Difenoconazole-1	323	21,11	5.4	0.999
44	Mpp oxon	262	11.39	3.1	0.998	90	Pretilachlor	176	13,54	2.6	0.999	136	Difenoconazole-2	323	21.24	4.7	0.999
45	Dithiopyr	354	11.40	5.2	0.999	91	Thifluzamide	194	13.66	2.2	0.998	137	Pyrazoxyfen	105	21.28	1.9	0.999
46	Pirimiphos-methyl	290	11,54	1.9	0.998	92	Fenthion oxon sulfoxide	262	13,68	2.2	0.999						

農薬 134 成分 5ppb の変動係数 (n=5)

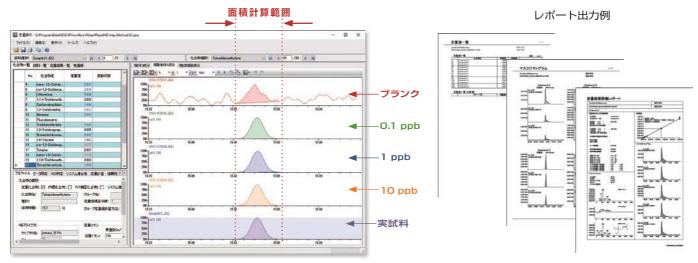
実績ある多成分定量解析ソフトウェア "Escrime™"





充実した定量解析機能を搭載! 定性解析までもフォローします

多成分定量解析ソフトウェア Escrime™ では、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。 定量条件作成及び解析は、MSPRIMO™との連携が可能です。より簡単に、効率よく解析作業を実施いただけます。 定量解析結果のレポートフォーマットは、目的・用途に応じて自由にカスタマイズ可能です。 Escrime™は多試料、多成分の定量解析に必須のソフトウェアです。

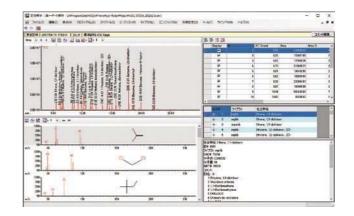


複数検体に含まれる成分ピーク、または一検体中の複数成分ピークを同一画面上に表示できます。 また、ピーク面積計算範囲を同時に変更でき、多検体が一括に処理できます。

また Escrime™ には、定性解析機能(別ウィンドウで起動)も搭載 しています。

スペクトル自動作成・ライブラリー検索、クロマトグラムピークリスト 作成、クロマトグラム作成などを行うことが可能です。

定性解析した結果を、定量条件に Drag&Drop でコピーして使用する ことが可能です。



ダイオキシン・PCB 専用定量解析ソフトウェア "TQ-DioK"



TQ-DioK は、Escrime™ とダイオキシン 類専用定量分析ソフトウェア DioK をベー スとして開発された、卓上型 GC-MS 専用 のダイオキシン・PCB 定量分析ソフトウェ アです。

TQ-DioK では環境試料中のダイオキシン分 析や、塗膜くず中の PCB 分析といった専門 的な定量分析作業の大半を自動化しており、 解析に要する時間を大幅に短縮しました。 Escrime™ の使い易さと、DioK の専門性 を兼ね備えた定量ソフトウェアです。



誰でも簡単にダイオキシン・PCB 定量分析が可能です

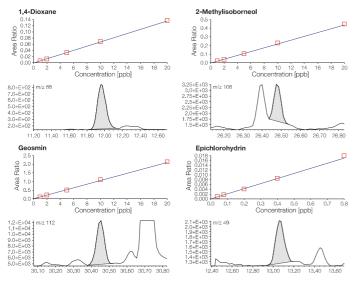
Escrime™ アプリケーション: 水中 VOC 成分等の定量分析(MSTips No. 333)

同一カラムによる VOC、カビ臭気原因物質、エピクロロヒドリン、スチレン、 1,2,3- トリクロロベンゼンの分析

水道の水質検査において、ヘッドスペース -GC-MS 法が複数の項目で 検査方法として採用されていますが、測定に使用する機器構成の違い により、1 台の装置で異なる項目を測定する際には、カラム交換等が 必要となるケースが殆どです。

今回、液相に (6% シアノプロピルフェニル - 94% ジメチルポリシロキサン)を採用した低/中極性カラム DB-1301(長さ 60 m, 内径 0.32 mm, 膜厚 1 μm)を使用して、水質基準項目の揮発性有機化合物 (VOC)、カビ臭原因物質である 2-メチルイソボルネオール (2-MIB)、ジェオスミンの 3 項目、要検討項目のエピクロロヒドリン、スチレン、1,2,3-トリクロロベンゼンの 3 項目を、それぞれ機器パラメーターのみ変更して測定する方法について検討したところ、検量線の直線性、下限濃度における再現性等について良好な結果が得られました。





Compound Name	C.V. (%)	R	Compound Name	C.V. (%)	R	Compound Name	C.V. (%)	R
1,1-Dichloroethylene	0.7	0.9999	Trichloroethylene	0.1	0.9999	m-Xylene & p-Xylene	0.3	0.9992
Dichloromethane	1.1	0.9999	1,2-Dichloropropane	0.8	0.9999	o-Xylene	0.4	0.9999
t-vhyl Ether	0.4	0.9999	Bromodichloromethane	0.6	0.9999	Bromoform	0.6	0.9990
trans-1,2-Dichloroethylene	0.7	0.9999	1,4-Dioxane	1.1	0.9999	p-Dichlorobenzene	1.1	0.9999
cis-1,2-Dichloroethylene	0.6	0.9999	cis-1,3-Dichloropropene	1.7	0.9990	2-Methylisoborneol	4.5	0.9996
Chloroform	8.0	0.9999	Toluene	0.7	0.9999	Geosmin	3.4	0.9996
1,1,1-Trichloroethane	0.4	0.9999	trans-1,3-Trichloroethane	2.2	0.9985	Epichlorohydrin	2.6	0.9999
Carbon Tetrachloride	1.6	0.9999	1,1,2-Trichloroethane	3.0	0.9990	Styene	1.5	0.9990
1,2-Dichloroethane	8.0	0.9998	Tetachloroethane	2.3	0.9996	1,2,3-Trichlorobenzene	9.0	0.9997
Benzene	1.2	0.9999	Dibromochloromethane	0.8	0.9991			

各成分下限濃度における変動係数 (n=5) と検量線相関係数 [下限濃度]

VOC(1.4-ジオキサン除く): 0.1 ppb 1.4-ジオキサン: 1 ppb 2-MIB、ジェオスミン: 1 ppt エピクロロヒドリン: 0.04 ppb スチレン、1,2,3-トリクロロベンゼン: 0.1 ppb

代表成分の検量線と抽出イオンクロマトグラム

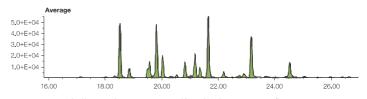
TQ-DioK アプリケーション: PCB 定量分析(MSTips No. 313)

GC-QMS 法による**塗膜くず中**の 低濃度 PCB 分析

定量対象試料としては試料量 5g の塗膜くずを「低濃度 PCB 含有廃棄物に関する測定方法(第 5 版)」に準拠する形で処理 し、内部標準物質として PCB 標準液 MBP-MXP (Wellington Laboratories 製) を添加したものを用いました。

測定条件は「絶縁油中の微量 PCB に関する簡易測定法マニュアル(第3版)」を参考に設定しました。

PCB 標準液から得た同族体でとの平均相対感度係数(AV-RRF)の相対標準偏差 (RSD) はそれぞれ $2.4 \sim 4.9\%$ となり、良好な再現性が得られました。得られた AV-RRF を用いて算出した塗膜くず中の PCB 濃度は 1.2~mg/kg となりました。



塗膜くず中の P5CB 平均同族体クロマトグラム



相対感度係数の再現性

統合定性解析ソフトウェア "msFineAnalysis iQ"



ライブラリー検索だけの定性分析から脱却! ソフトイオン化法データを組み合わせた 1 ランク上の定性解析を実現

GC-TOFMS 専用統合解析ソフトウェア msFineAnalysis で培ったノウハウを QMS データ解析に適用させた msFineAnalysis iQ の登場です。

msFineAnalysis iQ は、EIマススペクトルを用いたライブラリー検索と、ソフトイオン化マススペクトルを用いた分子量確認を組み合わせた、自動定性解析ソフトウェアです。ライブラリー検索結果にソフトイオン化マススペクトルの解釈を加えることで、従来のライブラリー検索だけの定性解析結果に比べて、同定確度の向上が期待されます。msFineAnalysis iQ は GC-MS 定性解析ソフトウェアの大本命です。



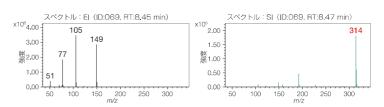
ライブラリー検索だけの定性分析に潜むリスク… それ、本当に同定できていますか?

EI 法はライブラリーデータベースが豊富なため、GC-MS 定性分析に幅広く使用されています。しかしながら EI 法はイオン化時のエネルギーが高く、分子イオンが生じないことがしばしばあります。

右に示す EI マススペクトルでは分子イオンが観測されていません。そしてライブラリー検索の結果 M.F. スコア 800 以上に 5 つの候補が得られました。 EI 法データだけですと最高スコアの#1 の化合物であると結論付けてしまいがちですか、この結論は誤りです。 なぜならこの化合物をソフトイオン化法で測定すると分子イオンと思われる m/z 314 が観測されていることから、この化合物は分子量314 である可能性が高く、#1 の候補の分子量と合致しないからです。

ソフトイオン化マススペクトルの結果と合致するのは #2 の候補であり、この化合物は #2 である可能性が高いと言えます。

ライブラリー検索だけではこのような誤認をしてしまう場合があり、ソフトイオン化データでの確認が 重要となります。

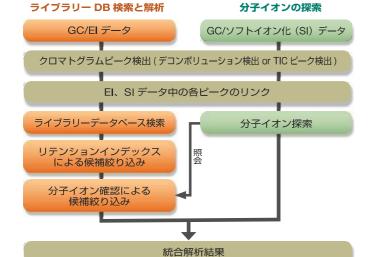


成分 A の El マススペクトル

成分 A のソフトイオン化 マススペクトル

#	化合物名	M.F.	分子式	分子量
1	2,2'-(Ethane-1,2-diylbis(oxy))bis(ethane-2,1-diyl) dibenzoate	828	C20 H22 O6	358
2	Diethylene glycol dibenzoate	821	C18 H18 O5	314
3	Benzoic acid, 2-(3-nitrophenyl)ethyl ester	810	C15 H13 N O4	271
4	1,3-Dioxolane, 2-(methoxymethyl)-2-phenyl-	802	C11 H14 O3	194
5	3,6,9,12-Tetraoxatetradecane-1,14-diyl dibenzoate	800	C24 H30 O8	446

成分 A のライブラリー検索結果 上位 5 候補



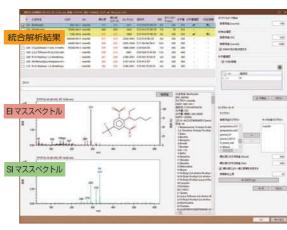
統合解析ワークフロー

msFineAnalysis iQ では、以下の作業を自動で行います。

- ①ピーク検出(デコンボリューション or TIC ピーク検出)
- ② EI と SI データの紐づけ(リンク)
- ③ライブラリ**ー**検索(EI)
- ④分子イオン探索(SI)
- ⑤ライブラリー検索結果の絞り込み(EI、SI 統合)
- ⑥統合解析結果の提供

ライブラリー検索だけの定性分析から脱却し、1 ランク上の定性 解析結果を、自動で迅速に提供致します。





クロマトグラム情報 統合解析結果(ライブラリー検索+分子イオン確認) スペクトル情報

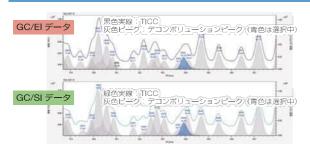
統合解析結果画面

個別マススペクトル解析画面

統合解析結果画面では、EI 及びソフトイオン化 (SI) クロマトグラムデータと、クロマトグラム情報、スペクトル情報、ライブラリー検索 と分子イオン解析結果を合わせた統合解析結果の確認が可能です。解析結果一覧で各行をダブルクリックすると、個別マススペクトル解 析画面が起動します。ここではライブラリー検索結果と分子イオン解析結果に対して、確認及び再解析が可能です。

msFineAnalysis iQ がもつ多彩な機能

デコンボリューション検出

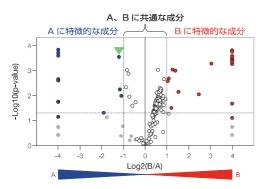


デコンボリューション検出例:

各ピークがデコンボリューション検出された成分を示しています

デコンボリューション検出では TICC 上で確認できない微量成分 や、あたかも 1 成分として検出されているピーク中の複数成分検 出(左図)が可能です。

2 検体比較(差異分析)機能

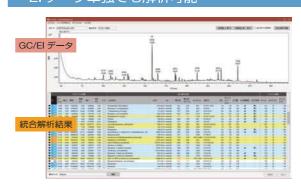


ボルケーノプロット:

2 検体間の差異と再現性を表現し、特徴成分を視覚的に捉えられます

定性分析において2検体の比較、例えば正常品と不良品、新 規材料と既存材料、といった分析ニーズが高まっています。 msFineAnalysis iQ を使えば自動で差異成分の抽出と定性 分析を実施します。

EI データ単独でも解析可能



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。EI データからの分子イオン探索とライブ ラリー検索を組み合わせた解析結果を提供します。

リテンションインデックス定性分析



リテンションインデックス作成画面

リテンションインデックス(保持指標)は n- アルカンの保持時 間を基準とした相対的な指標値です。

対象成分の保持時間を保持指標に変換し、データベースなどに収録 された保持指標値と比較することで定性分析を行うことが可能です。 msFineAnalysis iQ ではリテンションインデックス値による検 索候補の絞り込みが可能です。

ニーズに対応した**前処理装置との連携**

ヘッドスペース(HS)



カビ臭原因物質・トリハロメタン類モニタリングシステム MS-62180KTMS

■ Head space GC-MS システム

ヘッドスペースサンプラーは固体、液体内に存在する揮発性有機化合物 (VOC) 分析を行うための前処理装置です。

JEOL が開発したヘッドスペースオートサンプラーは、ループモードとトラップモード、2 つの測定モードを搭載したユニークな HS システムです。トラップモードでは水中カビ臭原因物質測定のような高感度測定に有効です。さらに食品、材料などにおける VOC 測定にも適用可能です。

パージ&トラップ(P&T)



■ Purge&Trap GC-MS システム

パージ&トラップ GC-MS システムは、パージ&トラップ濃縮装置と GC-MS を組み合わせたシステムです。カビ臭原因物質を初めとする揮発性有機化合物分析に威力を発揮します。

写真は Teledyne Tekmar 社製オートサンプラーー体型パージ&トラップ濃縮装置 Atomx XYZ と組み合わせたシステム構成です。

多機能オートサンプラー

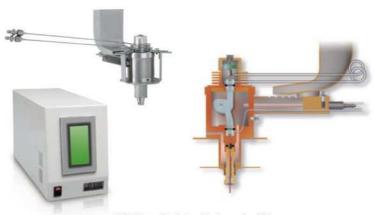


■ 多機能オートサンプラー GC-MS システム

PAL システムは 1 台で液体注入、ヘッドスペース (HS)、固相マイクロ抽出 (SPME)、固相抽出 (SPE) の自動化や液体試料の分注、希釈などが可能な多機能 オートサンプラーです。GC-MS と組み合わせることで、連続的に前処理を行いながら GC-MS 測定を行うことができます。

写真は CTC 社製多機能オートサンプラー (PAL RTC) と組み合わせたシステム構成です。

大量注入法



株式会社アイスティサイエンス 製 GC 大量注入口装置 LVI-S250

■ 大量注入システム

注入口において液体試料中の溶媒を選択的に除去することで、大容量の試料を注入することが可能な装置です。

食品中残留農薬分析や微量成分の分析に使用できます。

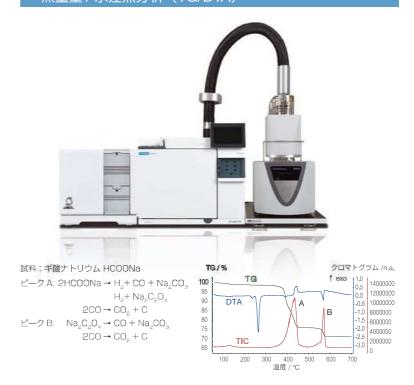
熱分解 (Pv)



パイロライザー GC-MS システムは、熱分解装置とGC-MS を組み合わせたシステムです。熱分解装置による熱抽出、あるいは熱分解によって生成する有機化合物分析に威力を発揮します。

写真はフロンティア・ラボ社製マルチショット・パイロライザー (EGA/PY-3030D) とオートショット・サンプラー (AS-1020E) と組み合わせたシステム構成です。

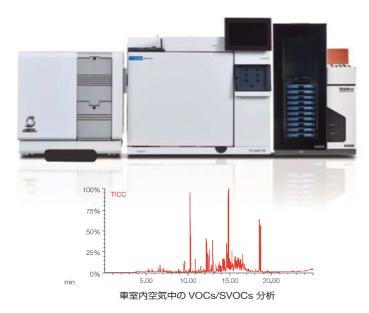
熱重量 / 示差熱分析(TG/DTA)



■ Thermogravimetry/Differential Thermal Analysis-MS システム

液体または固体試料を加熱していく過程の重量変化や化学変化に伴う発熱・吸熱といった熱物性評価を行う装置です。MSと接続することで加熱過程で発生する成分をリアルタイムに分析することができます。 高分子や材料の加熱による発生ガス分析に使用できます。

加熱脱着(TD)



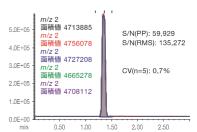
■ Thermal Desorption GC-MS システム

室内空気、車室内空気を TenaxTA 等の捕集材に捕集し、TD 法により分析できるシステムです。コールドトラップによる 2 次濃縮を行うことで、高感度な測定が可能です。

また、材料中から発生するガスをチャンバー捕集することで、揮発性/半揮発性有機化合物(VOCs/SVOCs)の分析に使用できます。

ガスバルブ





水素(*m/z* 2)10ppm の SIM クロマトグラムデータ

■ 混合ガス分析システム

ガスバルブシステムとパックドカラムを組み合わせる ことにより、混合ガス中の微量不純物成分分析に使用 することができます。また、水素も高感度に検出でき ます。

日本電子の質量分析計ラインナップ

GC-MS シリーズ



JEOL 製 GC-MS の特徴を継承しながらも、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。特に定量分析に強い GC-MS として農薬分析や環境分析で活用いただいています。



JMS-800Dは、HRGC/HRSIMモードにより、極微量環境汚染物質であるダイオキシン類やポリ塩化ビフェニル(PCBs)とその関連物質の測定にフォーカスしたガスクロマトグラフニ重収束質量分析です。

生産性の向上と保守コスト軽減を目的として様々な機能を搭載しています。



ガスクロマトグラフ飛行時間質量分析計 JMS-T2000GC AccuTOF™ GC-Alpha

第6世代のガスクロマトグラフ飛行時間質量分析計です。 クラス最高峰の分解能 30,000 を有し、観測したイオンの精密 質量から組成を知ることが可能です。ライブラリーデータベース に登録されていない未知物質の解析などで活用されています。 定性分析に強い GC-MS として、材料分析や環境試料中のノン ターゲット分析などで使用されています。

MALDI-TOFMS, LC-MS



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



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

JMS-S3000 はマスイメージ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。

JMS-T100LPはシンプル・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。

仕 様

QMS 基本構成

イオン源 El

イオン化エネルギー 10 ~ 200 eV チャンバー温度 100 ~ 300 ℃

分析部 高精度双曲形四重極マスフィルター

プラグインプリフィルタ一方式

検出部 コンバージョンダイノード/イオンマルチプライヤー検出方式

正負イオン検出可

排気系 差動排気型大形 TMP 1 台 (イオン源 200 L/s 排気相当、分析部 200 L/s 排気相当)

ロータリーポンプ 1 台(外付け、1.8 m³/h (50 Hz 動作時))

マスレンジ 1~1022 u

分解能 2,000 以上 (半値幅、m/z 614 において)

スキャン速度 22,222 u/s

感度 (EI) 検出下限値 (IDL) オクタフルオロナフタレン (OFN) 5 fg 以下 SIM・m/z 272

スキャン オクタフルオロナフタレン (OFN) 1 pg m/z 272 S/N 1000 以上 (RMS)

ガスクロマトグラフ [MS-62111AGC]

カラムオーブン 温度範囲:室温+4℃~450℃(設定:0.1℃ステップ)

大気温度の影響:1℃あたり0.01℃未満

昇温:20 段まで可能(最大昇温レート:120 ℃/min)

注入口 スプリット/スプリットレス注入口

最高使用温度:400 $^{\circ}$ (最大 2 ポートまで拡張可能)

圧力設定範囲 $0\sim680$ kPa(内径 0.200 mm 以上のカラムの場合)

トータルフロー $0 \sim 1250 \text{ mL/min(He)}$

設置条件

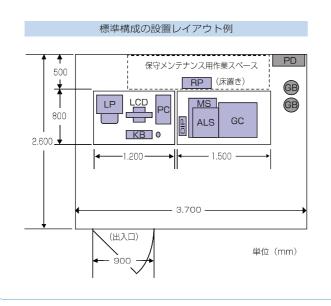
電源電圧 AC100 V (単相 50 Hz/60 Hz) 15 A x 2 系統

AC200 V (単相 50 Hz/60 Hz) 20 A x 1 系統

供給ガス キャリアガス:He ガス(99.9999% 以上、および炭化水素含有量 0.5 ppm 以下を推奨)

接 地 D種 (100 Ω以下) 必ず接地すること

換気設備 5 m³/min 以上



記号	名称
MS	QMS 本体
GC	ガスクロマトグラフ
PC	PC
LCD	ディスプレー
KB	キーボード
LP	レーザープリンター
RP	ロータリーポンプ
PD	配電盤
GB	ガスボンベ
DIP	DIP/DEP 直接導入プローブ(オプション)
ALS	GC オートサンプラー(オプション)

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。

♪パーコール 装置の故障・不具合が発生した場合、お客様からのご依頼によりすみやかに、技術者を派遣、または部品交換を手配致します。

オーバーホール / 整備 劣化・消耗した部品の交換や経時変化による整備及び点検を行います。

JEOL

Field Solution Service

保守契約 装置性能を定常的に維持し信頼性を確保致します。(定期点検/故障時は優先対応/計画的な予算運用)

お客様により良い快適を お届けするために 様々なサポート体制を 整えています。

周辺機器販売 装置をさらに使いやすく、分析・計測の幅を広げる周辺機器の販売。

部品販売 試料作製用材料・備品や装置稼働に欠かせない消耗品のほか、工具類・手袋・一般的な実験用消耗品も豊富に取り揃えております。

受託分析 JEOL 最新装置のノウハウを駆使して、最良のデータを提供致します。

装置性能をフルに引き出して頂けるよう豊富なコースで各種講習を行っております。

■ **設置室環境対策** 最高の分析結果をえるために、最新鋭の測定機器で装置の設置場所の環境を調査致します。JEOL 独自のノウハウを活かして、 最適な設置室をご提案致します。

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。 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。

詳しくは HPへ



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 $8:30\sim19:00$ (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

明伸工機株式会社 https://www.meishin-k.co.jp/



東京営業所 横浜営業所 相模営業所 土浦営業所 宇都宮営業所 北関東営業所 甲府営業所

03-3987-6261 名古屋営業所 052-703-1021 045-326-6090 刈谷営業所 0566-70-7744 046-228-8611 鈴鹿営業所 059-378-9733 029-824-9361 大阪営業所 06-6304-2332 028-639-5077 滋賀営業所 077-582-8077 0276-46-1092 姫路営業所 079-223-8234 055-222-7868

*外観・仕様は改良のため予告なく変更することがあります。

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。

策波支店 〒305-0033 茨城県つくば市東新井18番1



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

札幌支店 〒060-0809 北海道札幌市北区北9条西3丁目19番地 ノルテブラザ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

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販促率 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 産業機器営業部 TEL:03-6262-3570

MEソリューション販促室 TEL: 03-6262-3571 SE事業戦略本部 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 東京都立川市隔町2丁目8番3号 新鈴春ビル ソリューション推進室 TEL: 042-595-6886 FAX: 042-595-9227 ソリューションビジネス部(保守更新) TEL: 042-526-5098 FAX: 042-526-5099 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 TEL:06-6305-0121 FAX:06-6305-0105 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

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 新横浜干歳観光ビル6階

TEL: 082-221-2500 FAX: 082-221-3611 TEL: 092-411-2381 FAX: 092-473-1649

TEL: 045-474-2181 FAX: 045-474-2180

TEL:011-726-9680 FAX:011-717-7305

TEL: 022-222-3324 FAX: 022-265-0202

TEL: 029-856-3220 EAX: 029-856-1639

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

名古屋支店 〒450-0001 愛知県名古屋市中村区那古野1丁目47番1号 名古屋国際センタービル14階 TEL:052-581-1406 FAX:052-581-2887

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 TEL:06-6304-3941 FAX:06-6304-7377