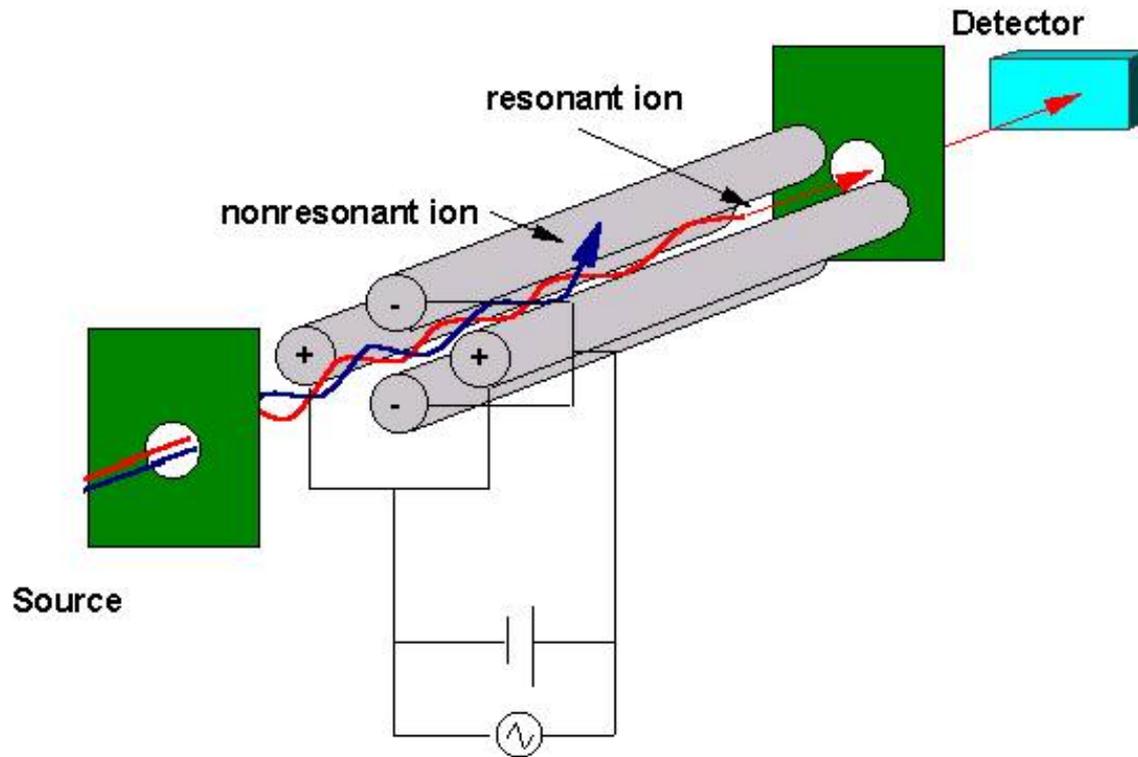


# 3. LC/MSの種類

- Quadrupole 四重極型
- Ion Trap イオントラップ型
- Time-of-Flight 飛行時間型
- Hybrid ハイブリッド型

他に二重収束磁場型、フーリエ変換イオンサイクロトロン (FT-ICR)型などがある。

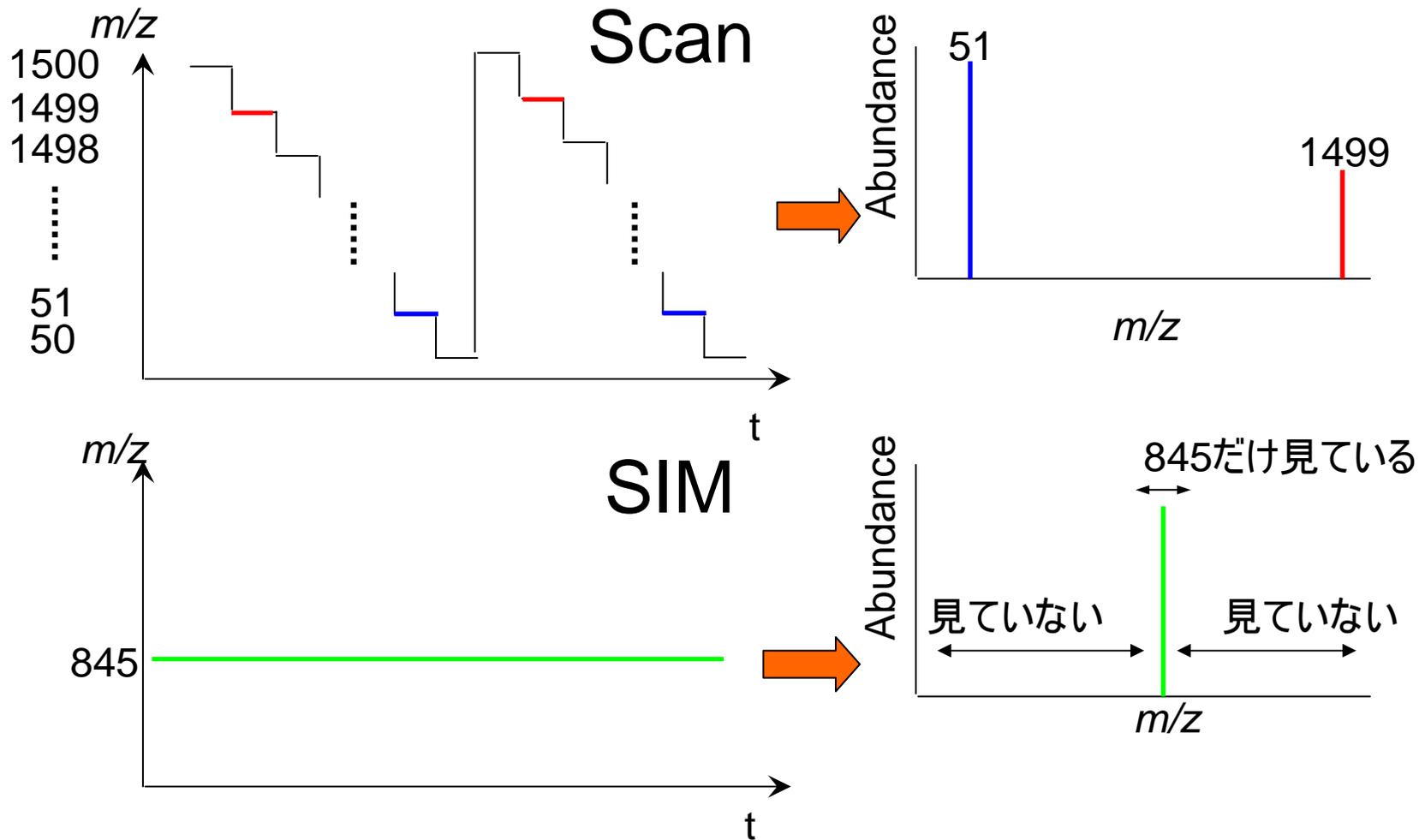
# Single Quadrupole (シングル四重極型)



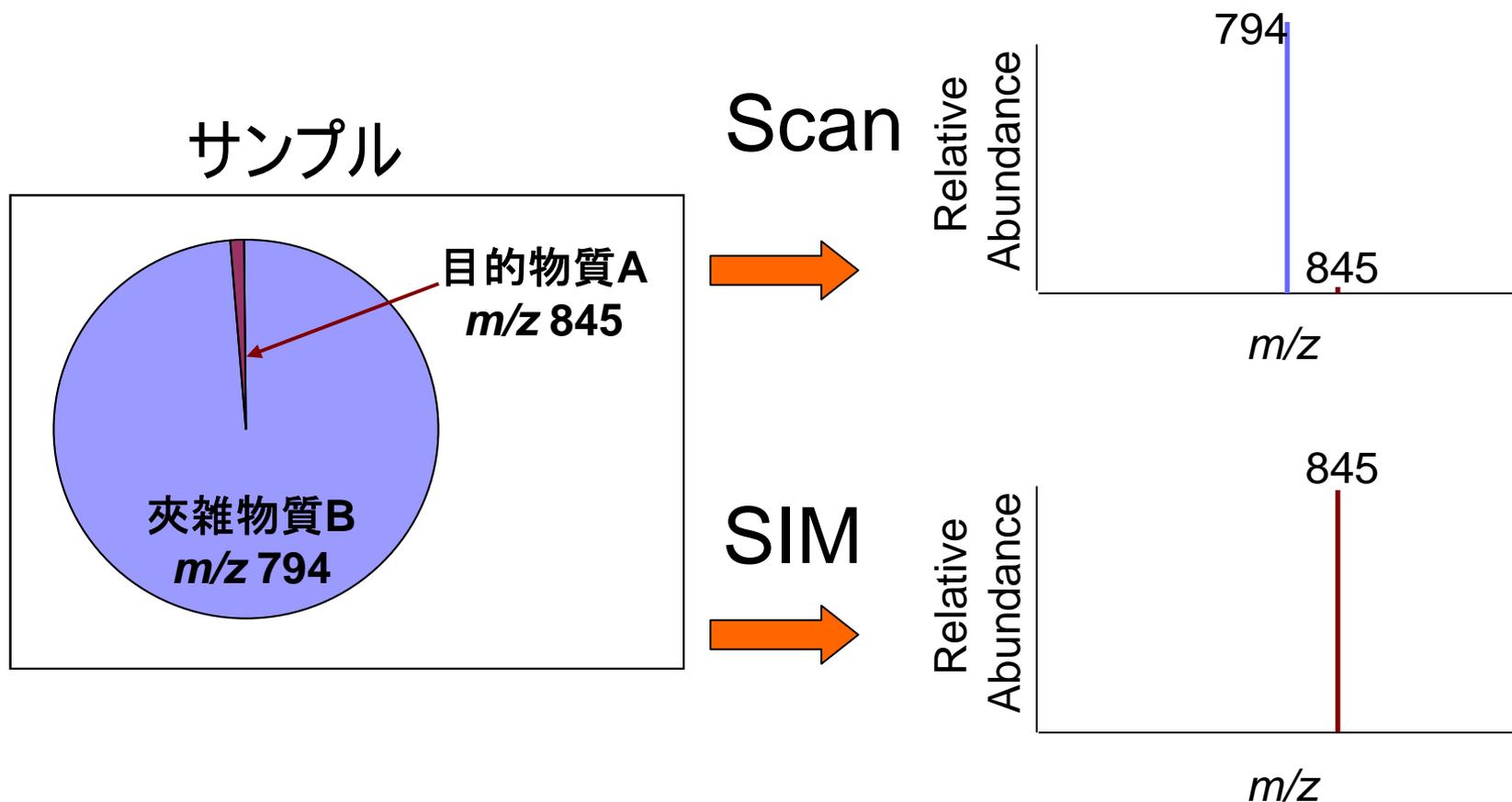
- 交互に極性を与られた四重極の電氣的周波数を変えることで、通過出来るイオンの質量を走査している。
- 分解能は低いが操作が簡単で軽量、小型かつ安価なシステムが組める。
- マスレンジ上限は1000～2000。GC、LCどちらとも相性が良い。
- SIMにより、選択性の高い検出が行える。

# ScanとSIM (Selected Ion Monitoring)とは

特定の $m/z$ のイオンが通過する様に  
四重極の電氣的周波数を変化させている

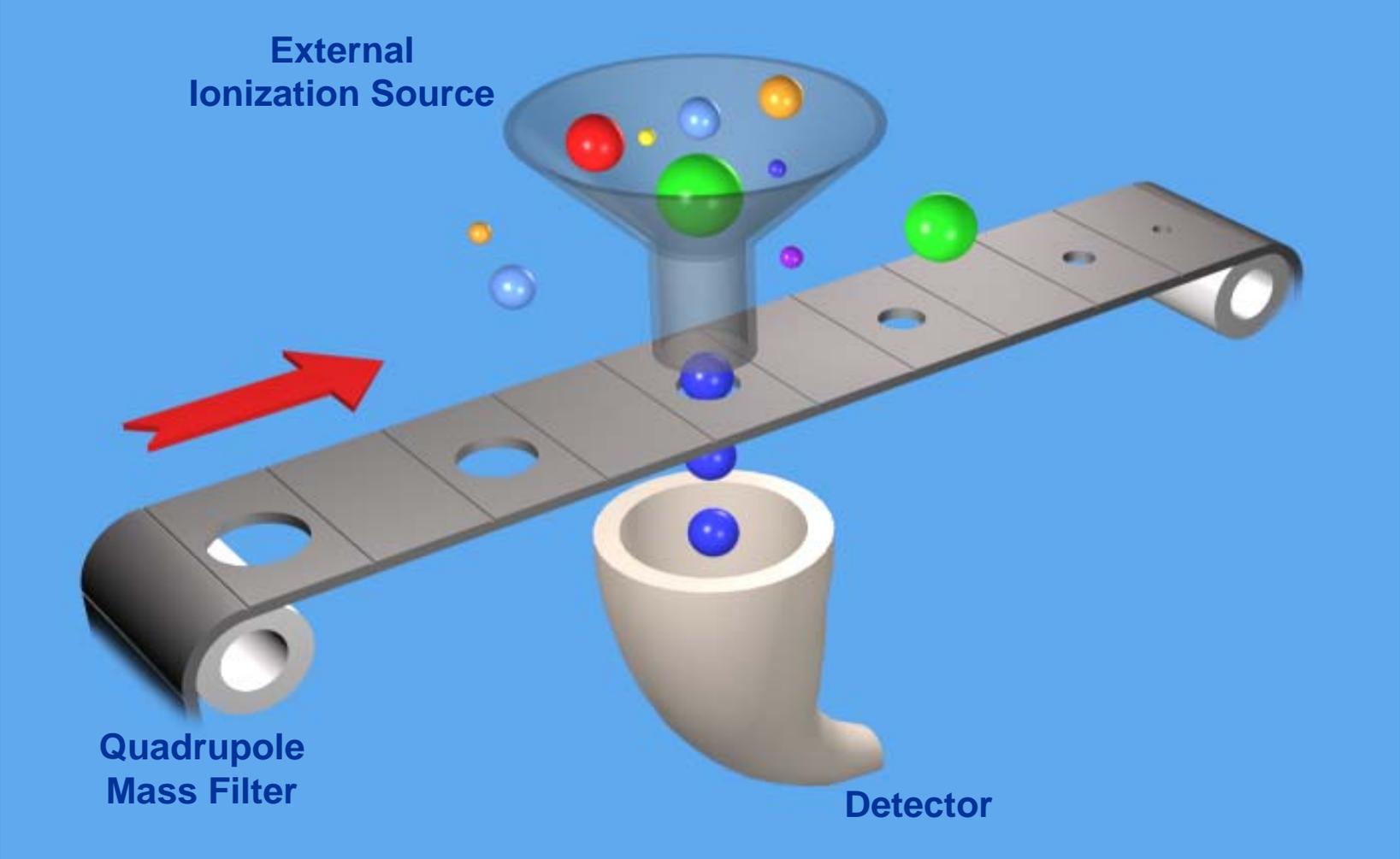


# SIMの利点



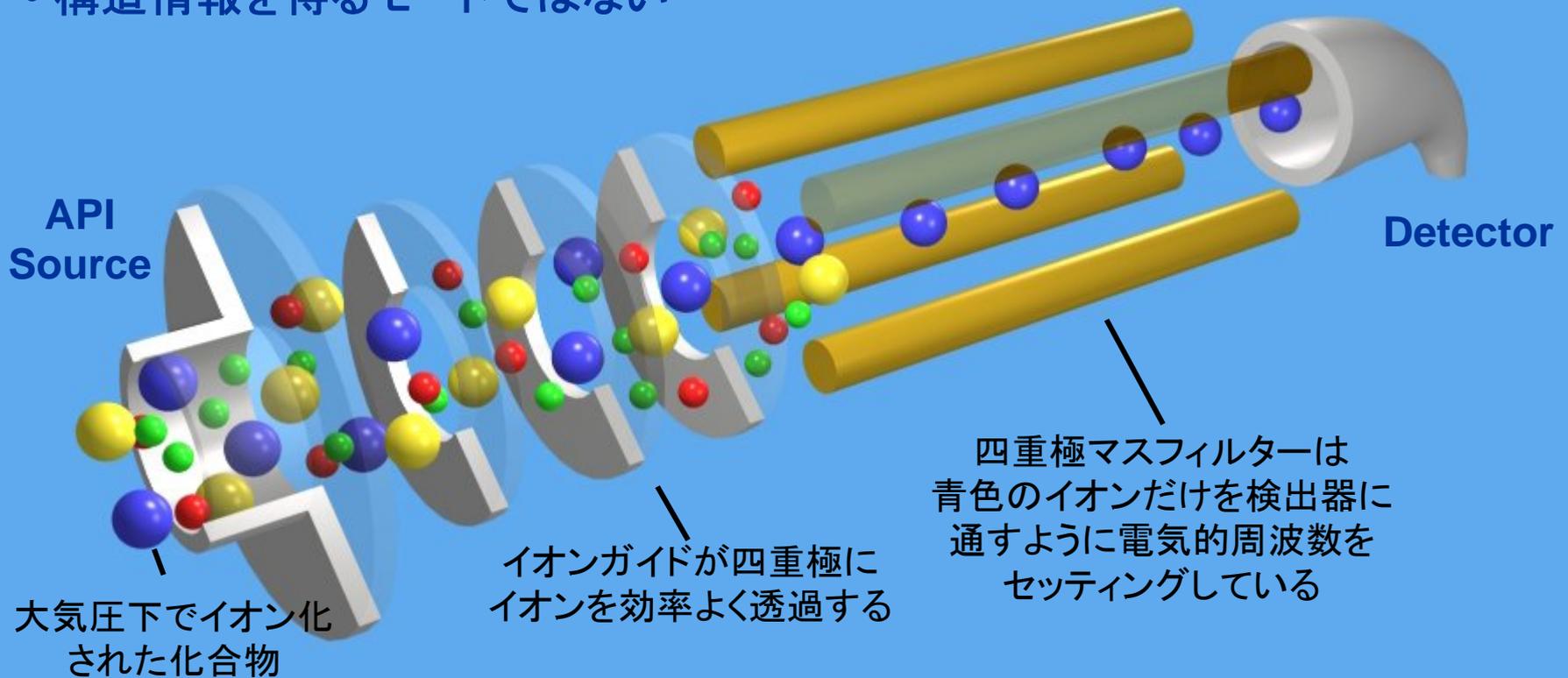
- SIMを使うことで、多量の夾雑物質を含むサンプルでもS/N比の良いデータを得ることが出来る。
- “スキンスペクトル中にピークがない”事と、“目的物質がない”事は必ずしもイコールではない。

# Conceptual Model of a Single Quadrupole Mass Spectrometer

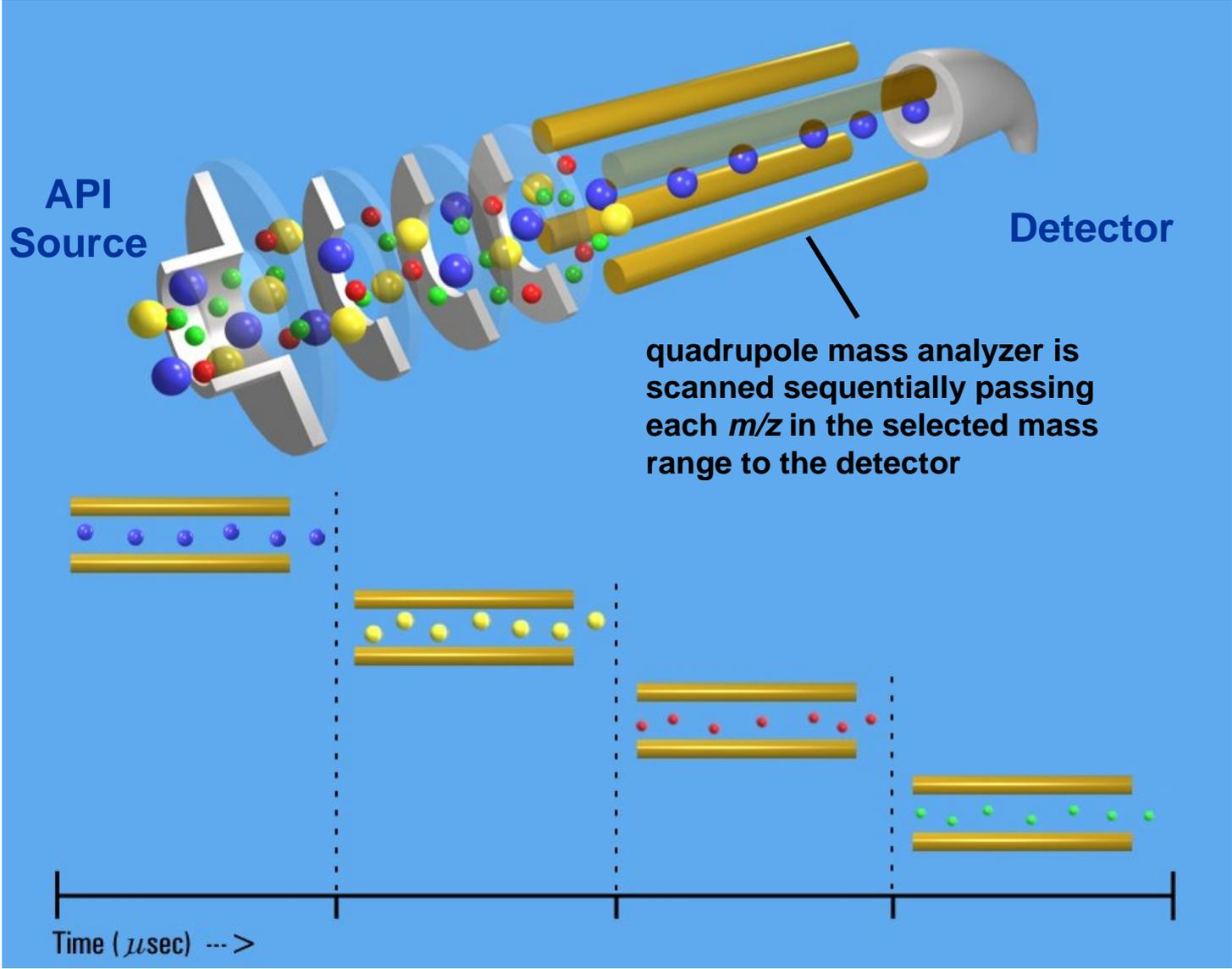


# Single Quadrupole: SIM

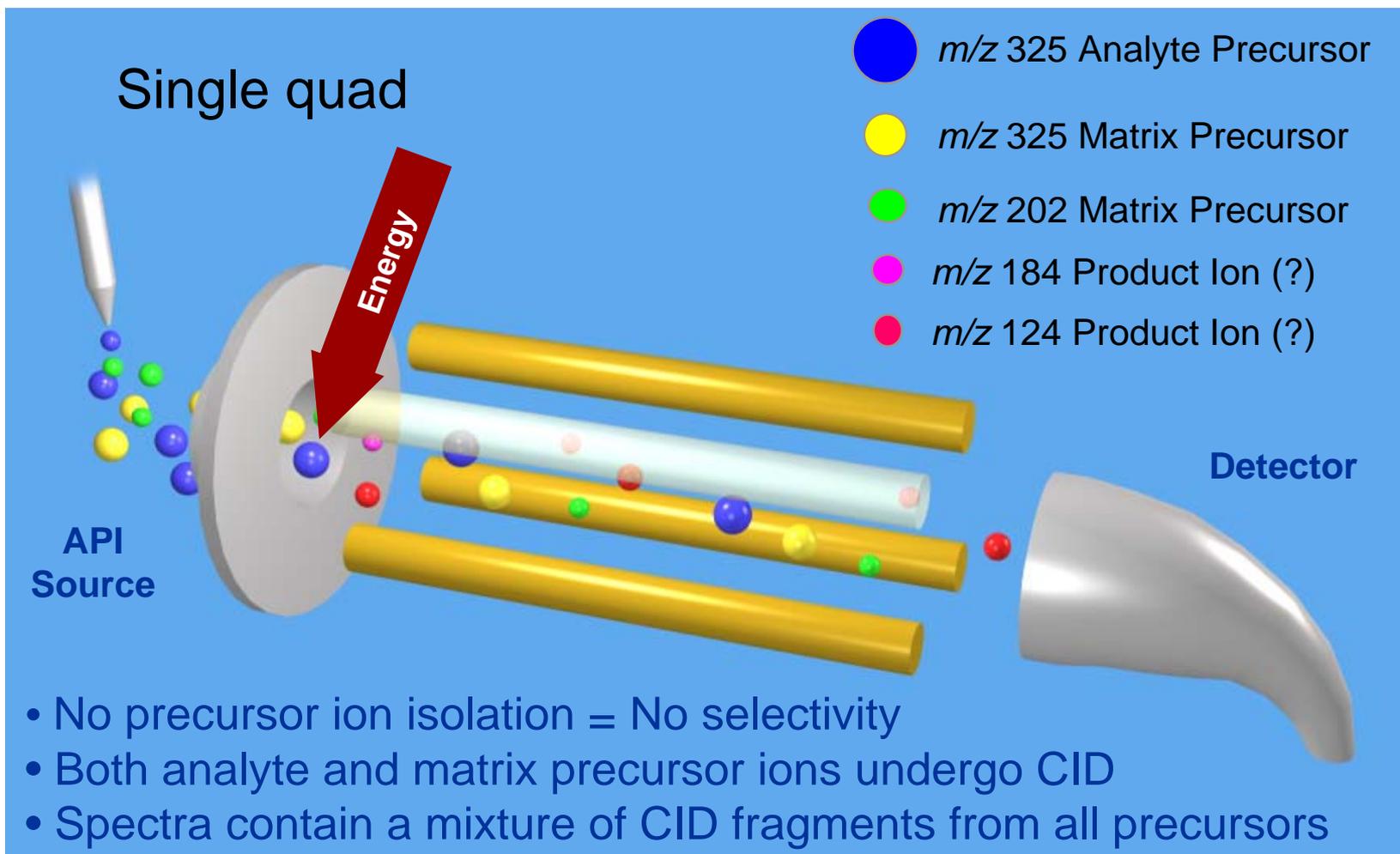
- 定量モードとして使われる
- 選択性が高い
- 構造情報を得るモードではない



# Single Quadrupole: Full Scan MS



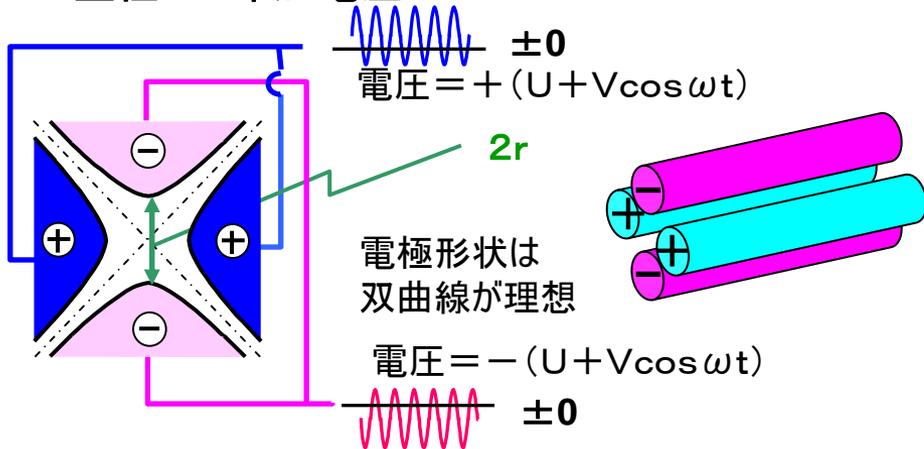
# What about MS/MS? In-source CID



# 四重極質量分析計の構造と原理

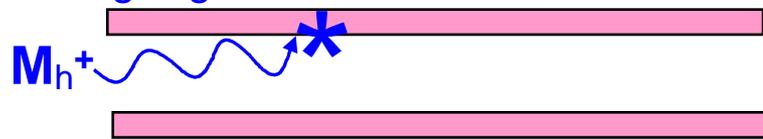
- ・スキャンスピードが速く、真空度が比較的低くても ( $1 \times 10^{-5} \sim -6 \text{ Torr}$ ) 機能するため、LC/MSに適したマスフィルターである。

## 四重極への印加電圧



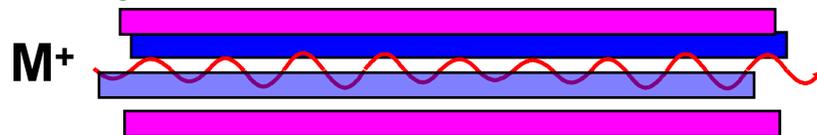
## Filtering High Mass

## Negative Rods



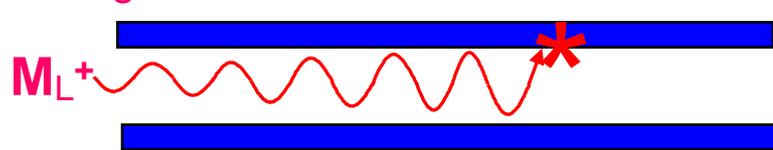
## Filtering Selected Mass

## Q-pole

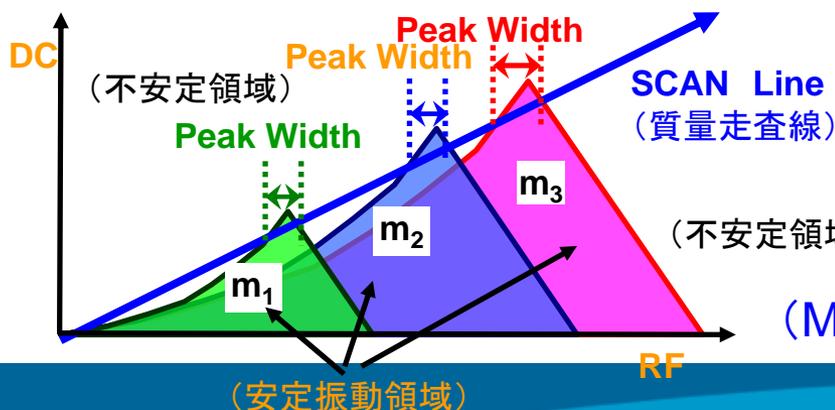


## Filtering Low Mass

## Positive Rods

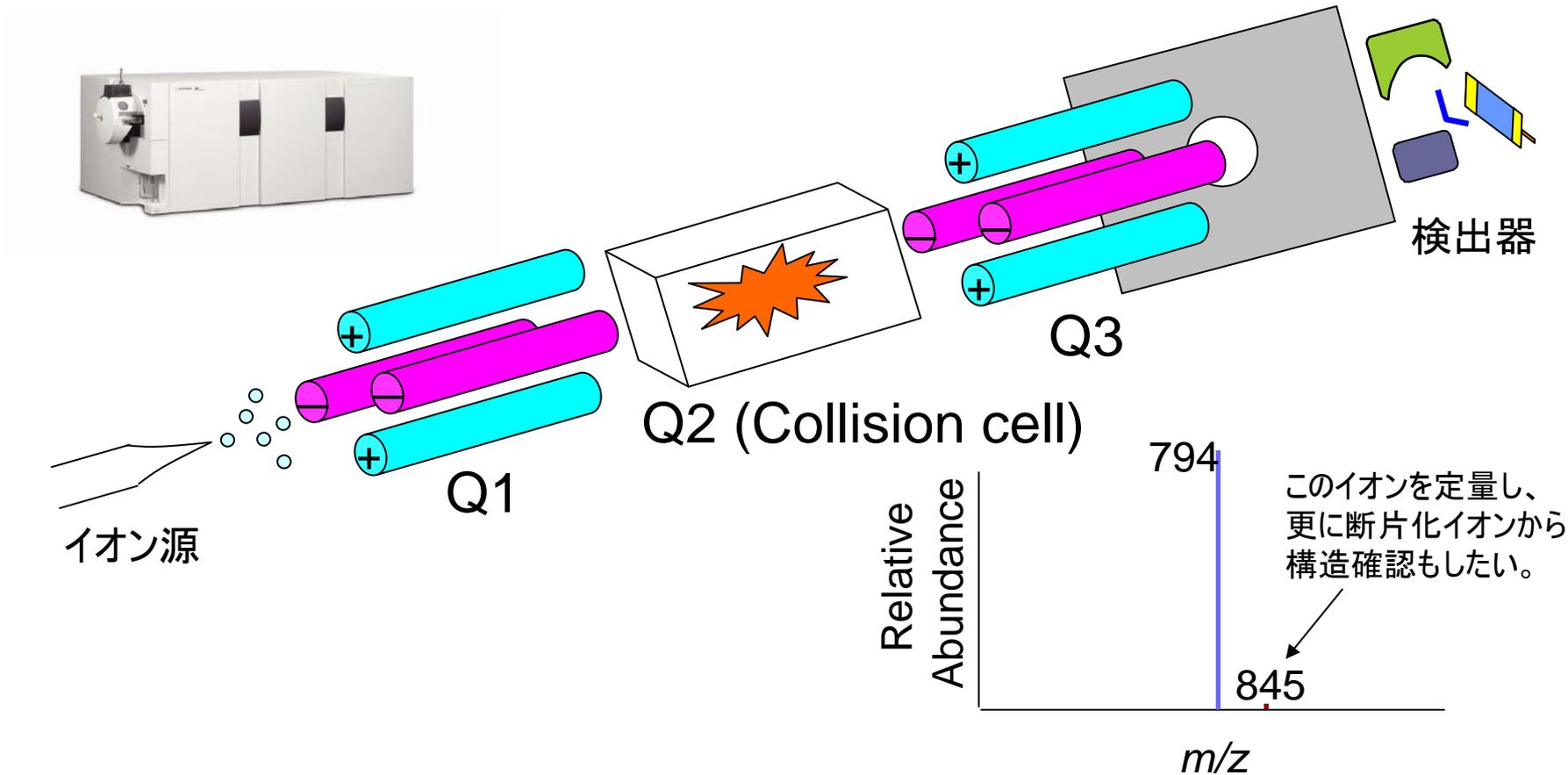


電極の平行精度: 数  $\mu\text{m}$  以下にする必要がある。



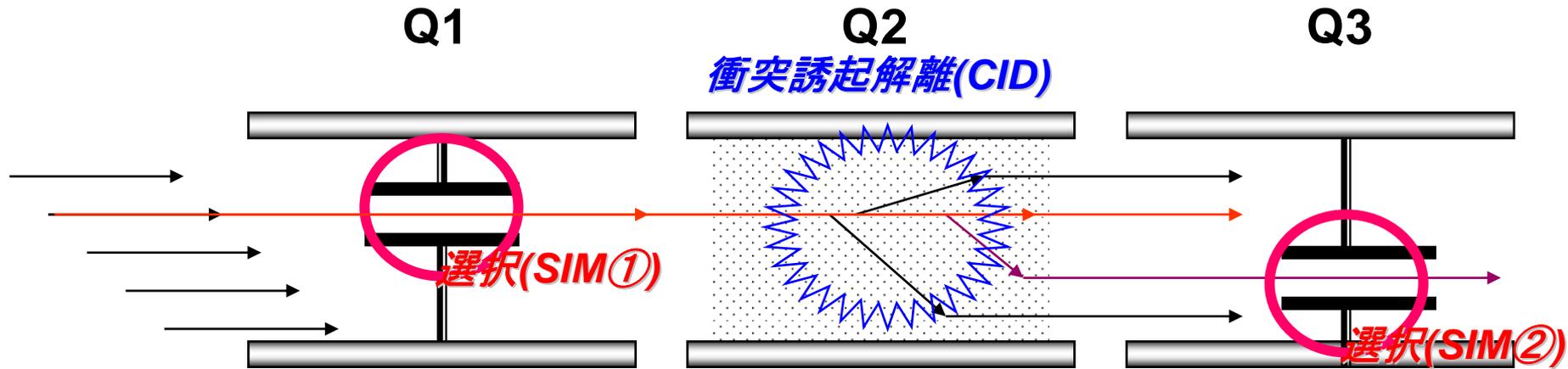
(Mathieuのイオン安定曲線)

# Triple Quadrupole (トリプル四重極)型



- 四重極を直線上に配置し、その間に中性ガスによるコリジョンセルを設けている。
- MS/MSを行える最も安価な装置。
- 四重極による選択性が高いので、夾雑成分の多いサンプルの定量分析に向く。

# トリプル四重極型で用いられる、定量分析MRM (Multiple Reaction Monitoring)のしくみ

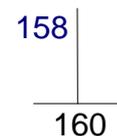
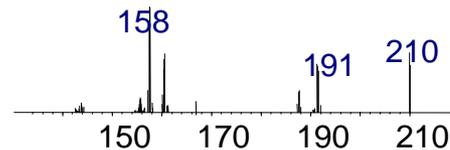
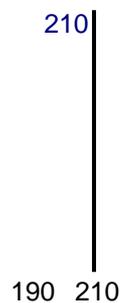
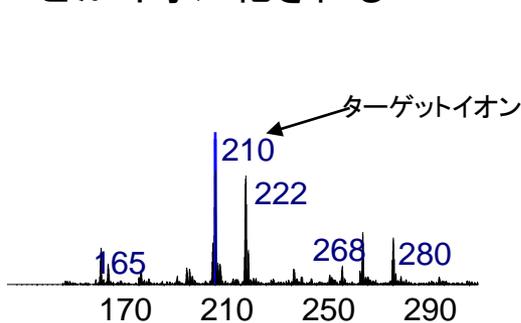


イオンソース内では共溶出化合物やバックグラウンド化合物などがイオン化される

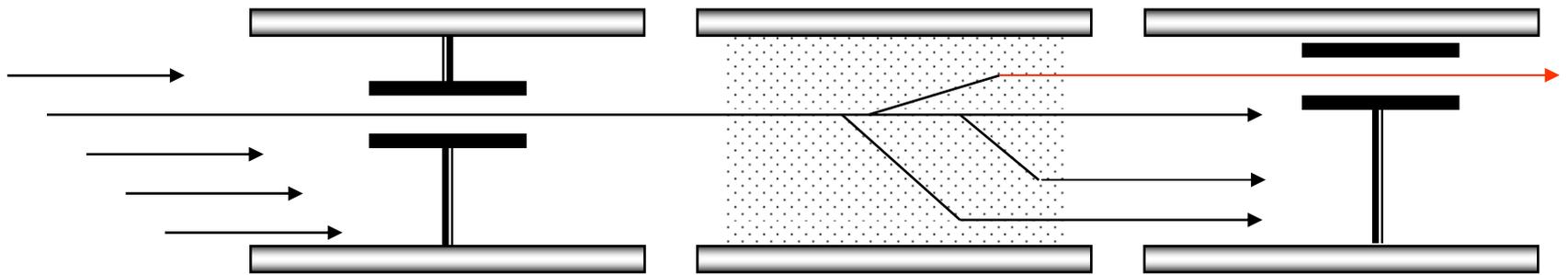
Q1はターゲットイオン (m/z 210) だけを通過させる

コリジョンセルでターゲットイオン (m/z 210) を開裂させる

Q3で m/z 210のイオンから生成した特有のフラグメントイオン (m/z 158) を通過させる



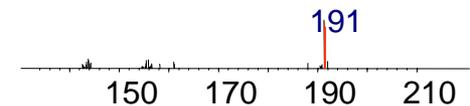
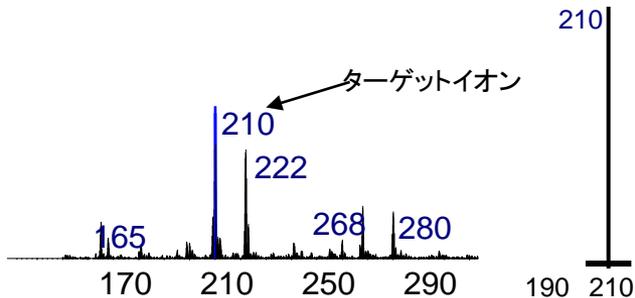
# トリプル四重極型でよく用いられる、定性方法 Product Ion SCAN



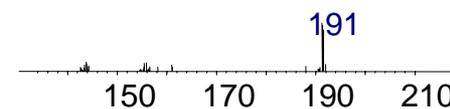
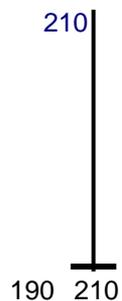
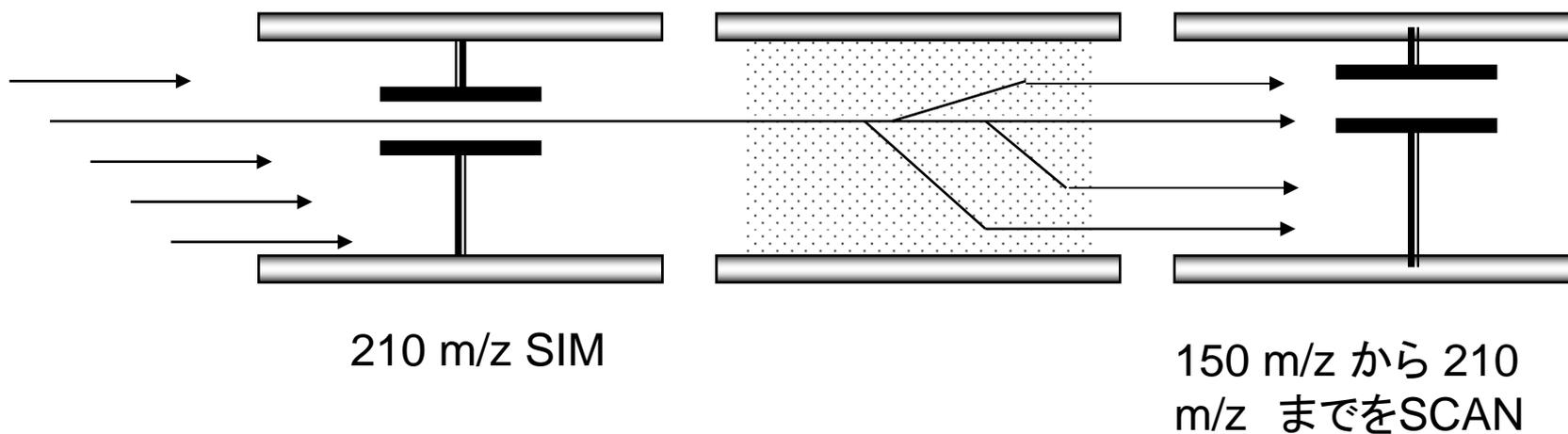
イオンソース内では  
共溶出化合物やバック  
グラウンド化合物など  
がイオン化される

**210 m/z SIM**  
Q1はターゲットイオン  
(m/z 210) だけを通  
過させる

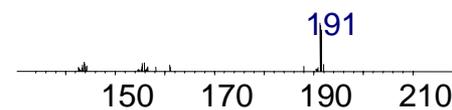
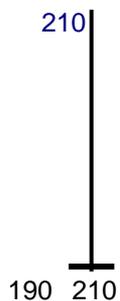
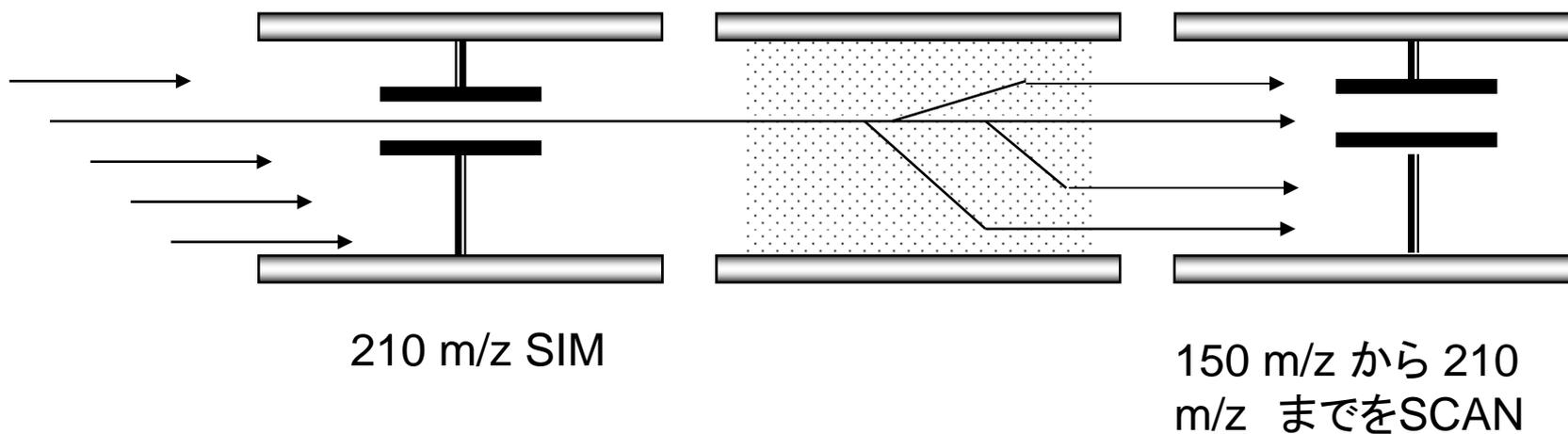
150 m/z から 210  
m/z までをSCAN



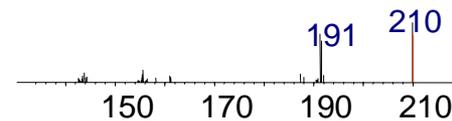
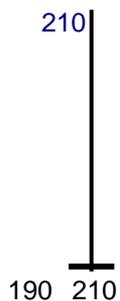
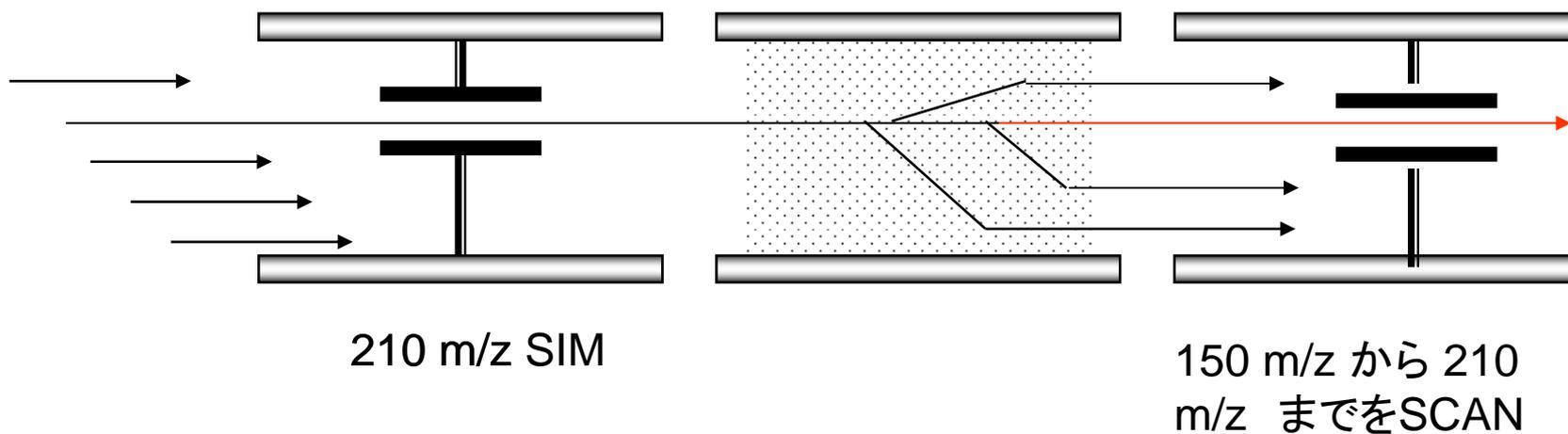
# Product Ion SCAN



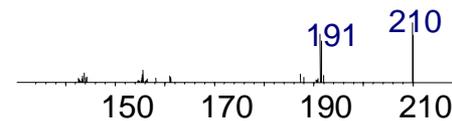
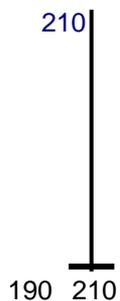
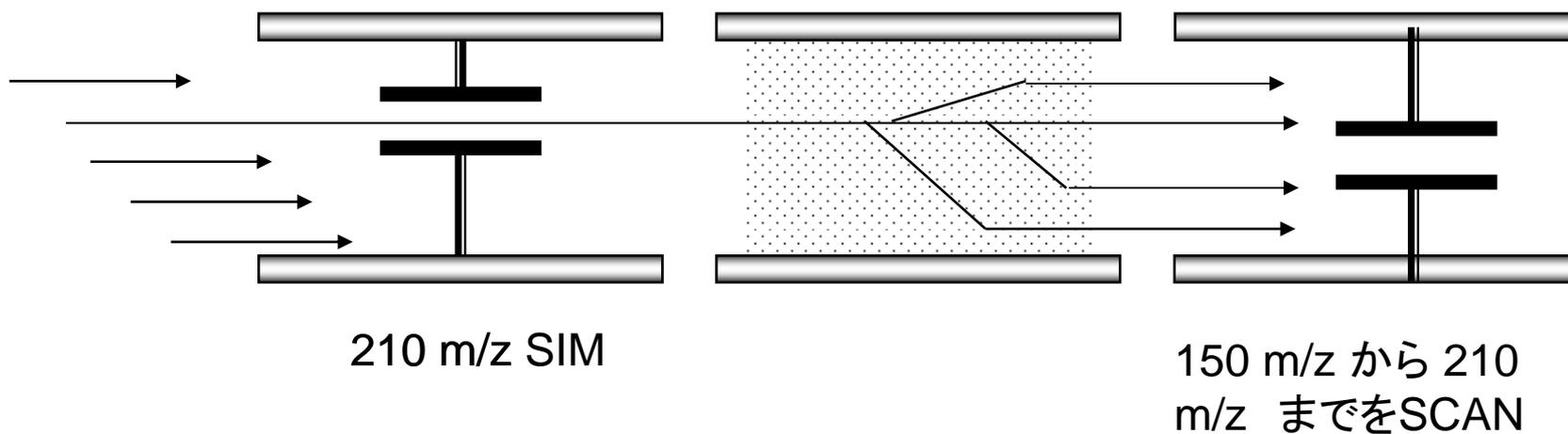
# Product Ion SCAN



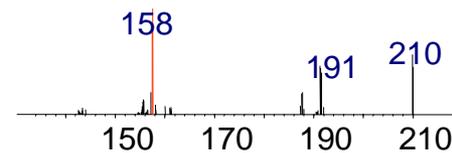
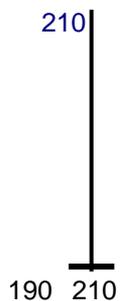
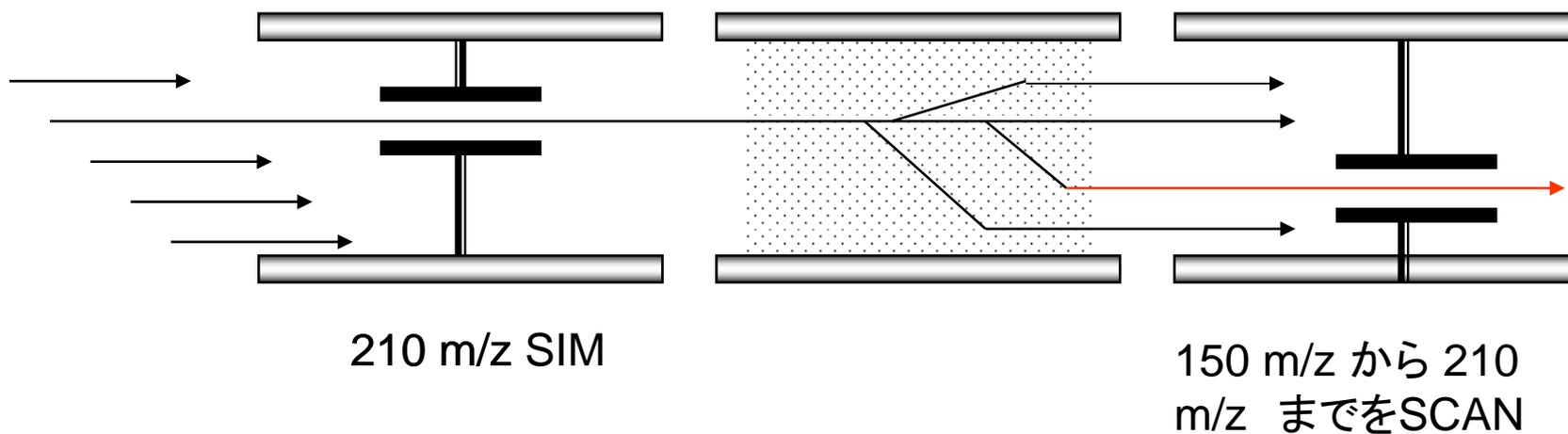
# Product Ion SCAN



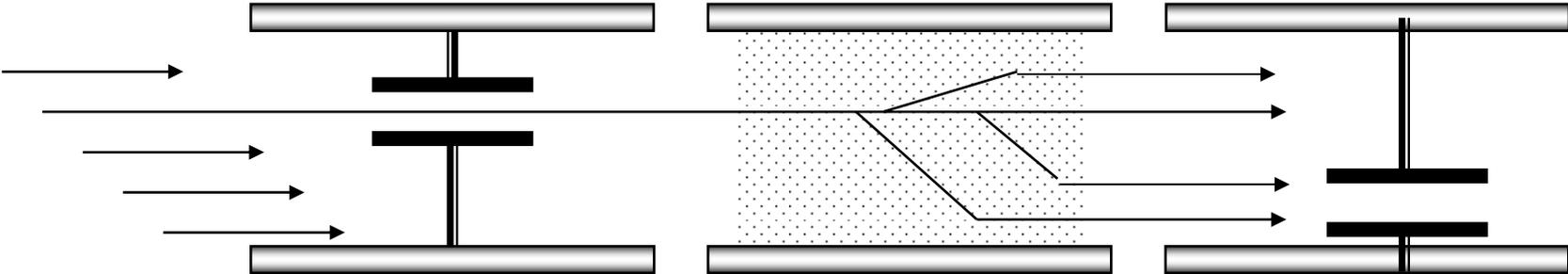
# Product Ion SCAN



# Product Ion SCAN

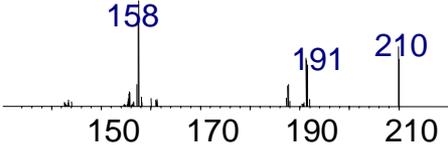
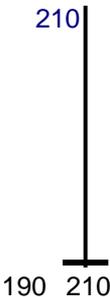


# Product Ion SCAN

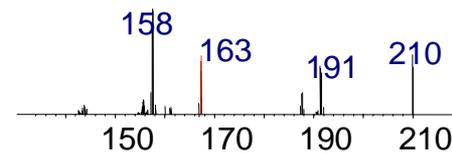
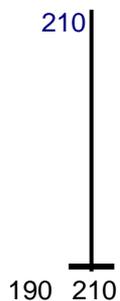
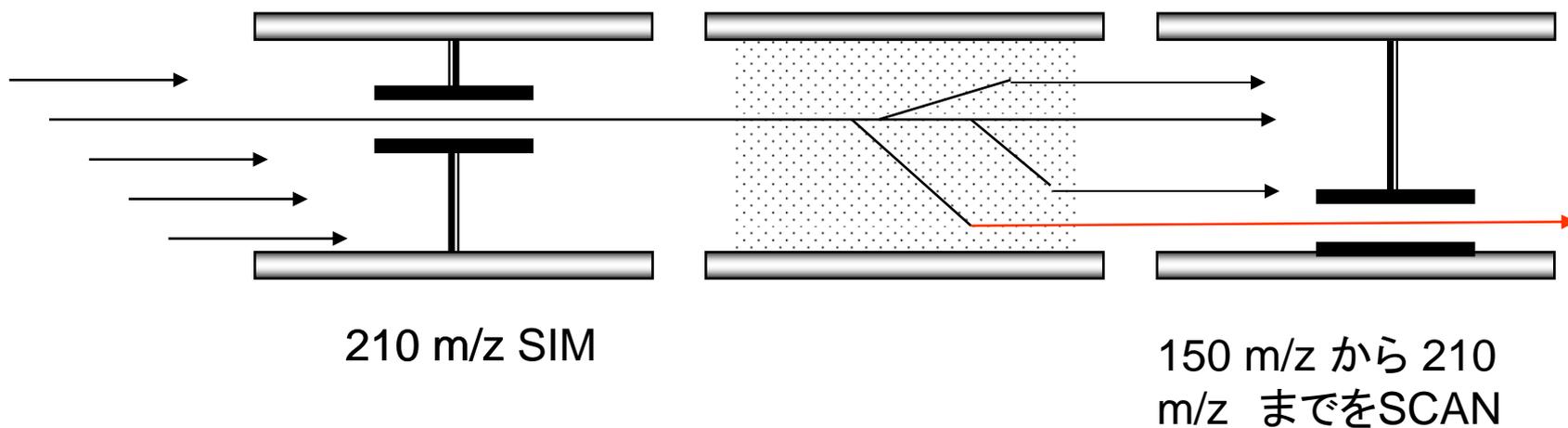


210 m/z SIM

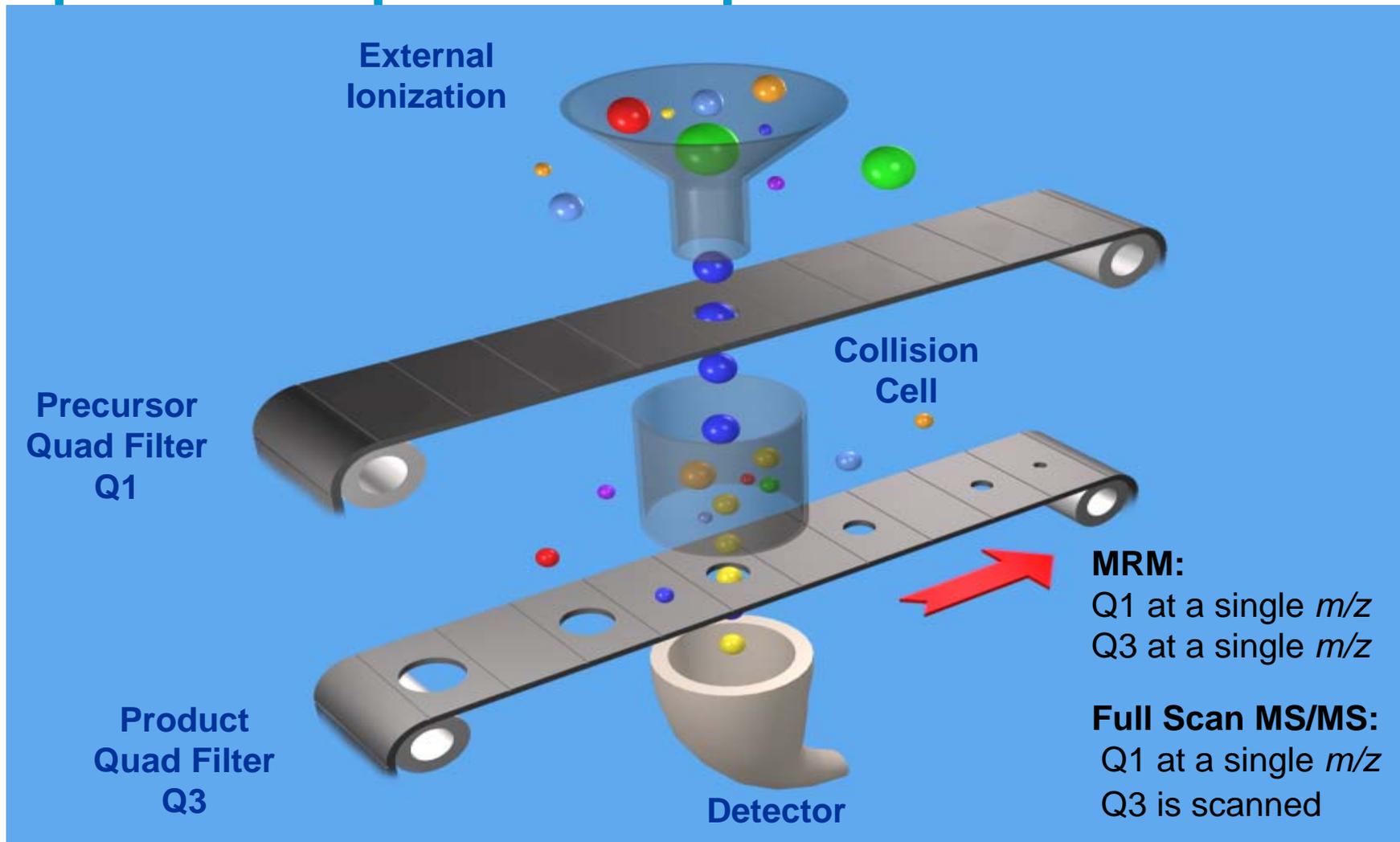
150 m/z から 210 m/z までをSCAN



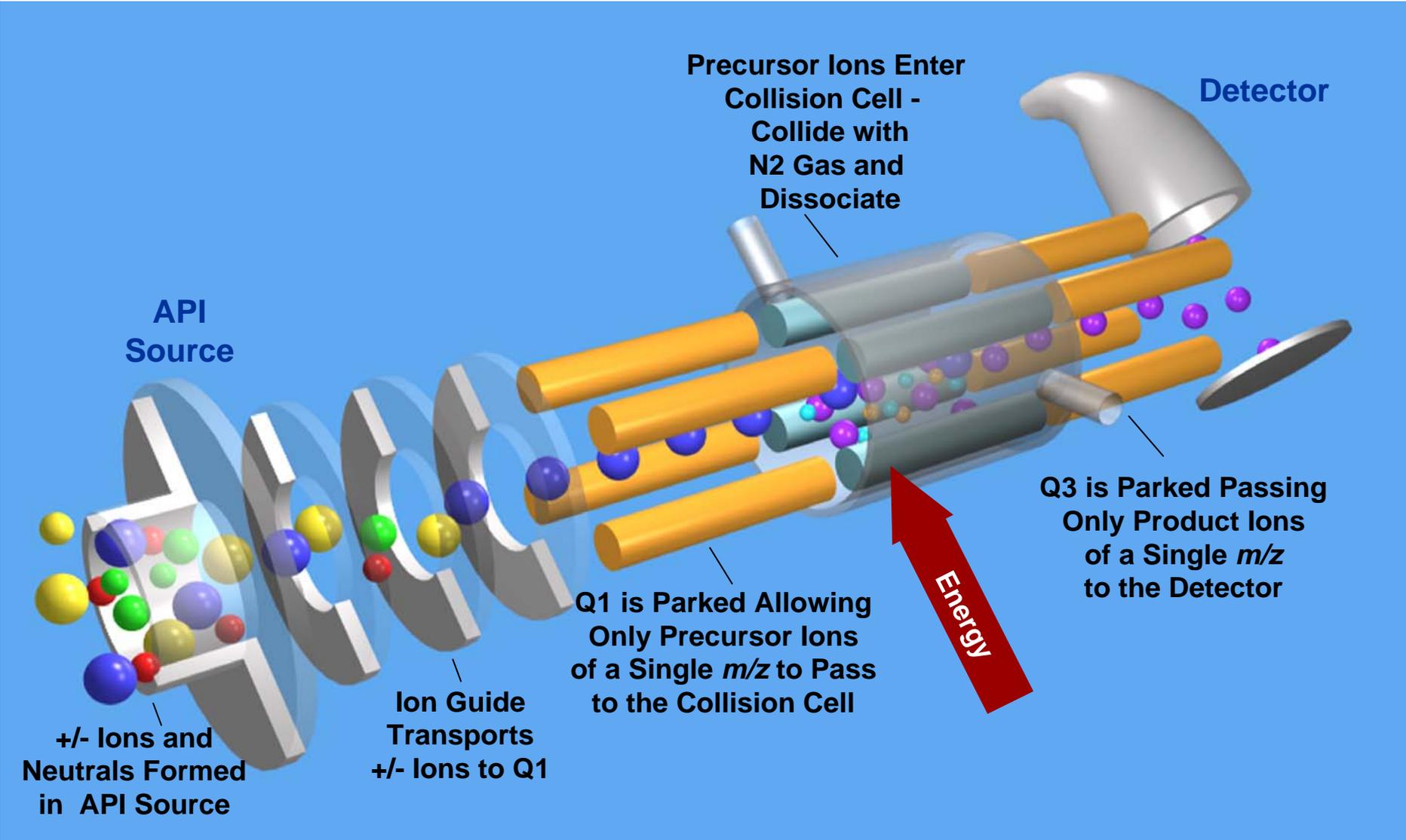
# Product Ion SCAN



# Conceptual Model of a Triple Quadrupole Mass Spectrometer



# Triple Quadrupole: MRM



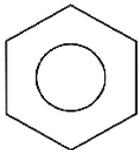
# MSを使った定量分析には、

1. 外部標準物質を使って検量線を引く方法
  2. 安定同位体で標識した内部標準物質を使う方法
- がある。

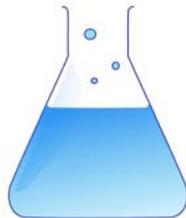
## (1. の方法の概念)

環境水中のベンゼンを定量したい、、、

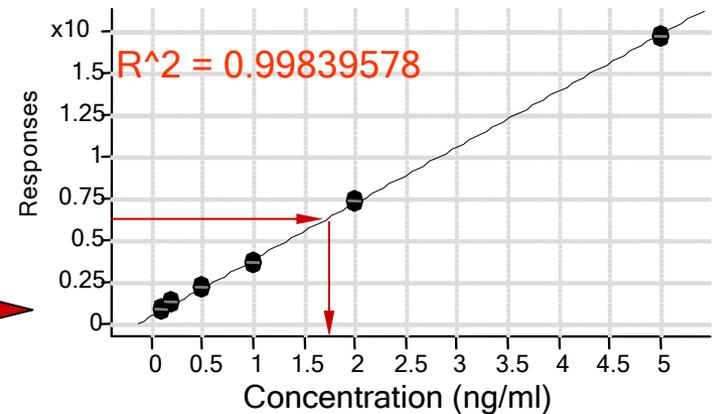
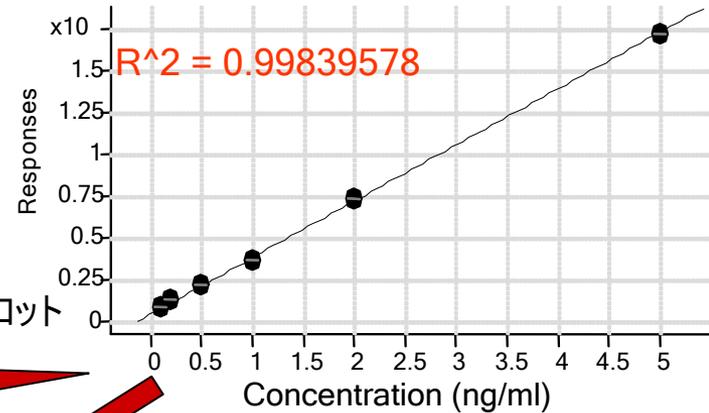
ベンゼン溶液をいくつかの濃度に調製してSIM (or MRM) 測定し、イオン強度とプロット (検量線を作成) する。



Benzene  
C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>



環境水をSIM (or MRM) 測定する。



得られたイオン強度から、濃度を決定する。

# MSを使った定量分析

## 2. 安定同位体で標識した内部標準物質を使う方法

(2. の方法の概念)

