

“AccuTOF GC”における 1 点ドリフト質量較正について

飛行時間型質量分析計 (TOF MS) における質量と飛行時間の関係は系統誤差が少ないことにより、本質的に質量精度が高いという特長をもつ。JMS-T100GC “AccuTOF GC” では 1 つの内部標準イオンによる 1 点ドリフト質量較正により、高い質量精度で精密質量測定が行える。そのため磁場型 MS と比べて測定操作は容易となり、さらに今までは困難とされてきた EI 法以外のイオン化法 (CI 法、FI 法、FD 法) での精密質量測定も簡便に行うことが可能である。

今回、“AccuTOF GC”にて様々な 1 点ドリフト質量較正について検証を行ったので報告する。

1. 磁場型 MS と AccuTOF GC での精密質量測定

磁場型 MS で精密質量測定を行う際は、精密質量を求めたい対象イオンの前後に、複数の内部標準イオンが必要であった。そのため内部標準物質としては PFK などの多数のイオンが観測されるものが使われてきた。これに対し AccuTOF GC では内部標準イオンが 1 つで精密質量を容易に得ることが出来る。従来機種と AccuTOF GC での精密質量を得る際の概念図を図 1 に示す。

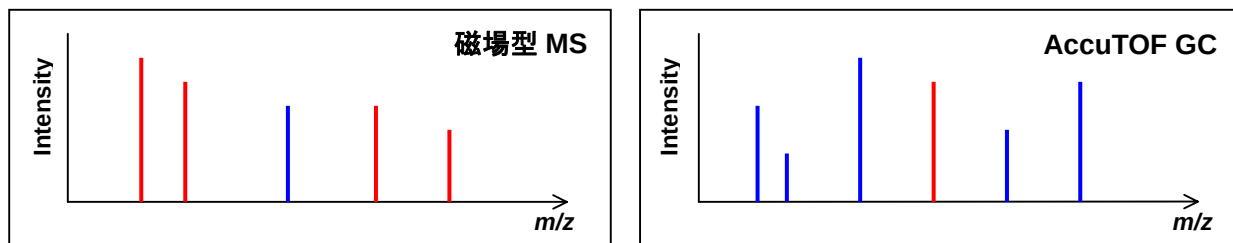


図 1. 精密質量測定概念図 (赤ピーク: 内部標準イオン、青ピーク: 対象イオン)

AccuTOF GC では内部標準イオン 1 つで複数イオンの精密質量を同時に得ることが可能である (図 1)。AccuTOF GC での精密質量測定では内部標準イオン 1 つで行えるために、磁場型 MS に比べて操作が簡単であり、さらに EI 法以外のイオン化法でも精密質量を簡単に得ることが出来る。

内部標準イオンは質量既知のものであれば、その種類を選ばない。以下に内部標準イオンとして

①PFK、②カラムブリード、③分子イオン、を使用した例について示す。

2-1. PFK イオンによる 1 点ドリフト質量校正

以下に PFK とヘキサクロロベンゼン（以下 HCB）の混在質量スペクトルを示す。

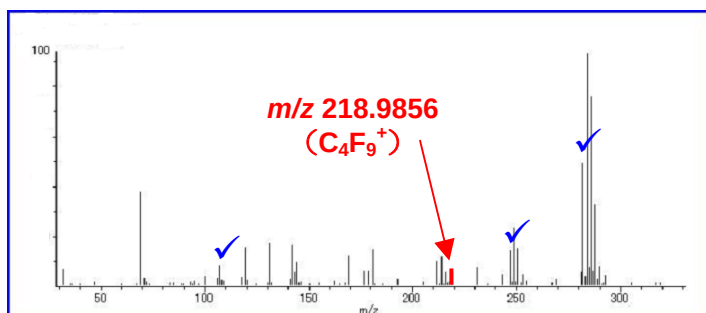


図 2. HCB と PFK 混在質量スペクトル

表 1. 精密質量測定結果 (PFK イオン使用)

実測値	理論値	誤差 (mmu)	推定組成式
106.9688	106.9689	-0.1	C ₆ Cl
246.8431	246.8443	-1.2	C ₆ Cl ₅
281.8114	281.8131	-1.7	C ₆ Cl ₆

磁場型 MS でも使用されている PFK をリザーバーから測定中に導入することで、精密質量を得ることが出来た。また、分子イオンとフラグメントイオンの複数イオンの精密質量を精度よく同時に得ることが出来た。

2-2. カラムブリードイオンによる 1 点ドリフト質量校正

以下にジメチルポリシロキサン系カラムを使用した際に観測されるカラムブリードイオンを使用した例を示す。

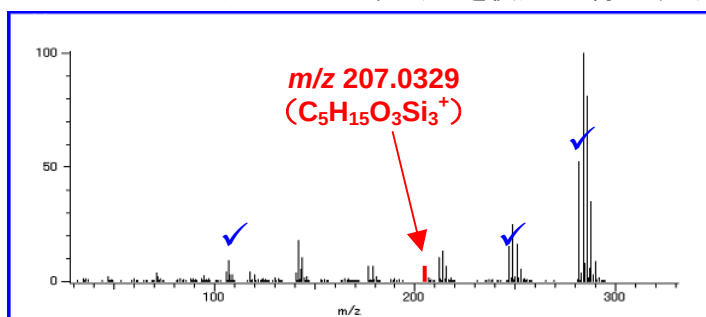


図 3. HCB 質量スペクトル

表 2. 精密質量測定結果
(カラムブリードイオン使用)

実測値	理論値	誤差 (mmu)	推定組成式
106.9692	106.9689	0.3	C ₆ Cl
246.8436	246.8443	-0.7	C ₆ Cl ₅
281.8117	281.8131	-1.4	C ₆ Cl ₆

通常の GC/MS (EI 法) にて観測されてしまうカラムブリードイオンを利用することで、内部標準物質をリザーバー等から導入することなく、分子イオンとフラグメントイオンの精密質量を精度よく同時に得ることが出来た。

2-3. 分子イオンによる 1 点ドリフト質量校正

以下に内部標準イオンに分子イオンを使用した例を示す。

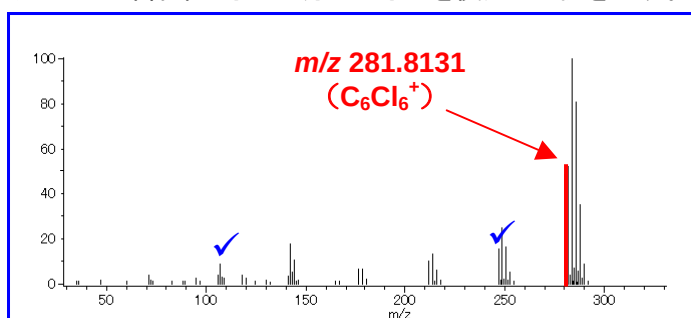


図 4. HCB 質量スペクトル

表 3. 精密質量測定結果 (分子イオン使用)

実測値	理論値	誤差 (mmu)	推定組成式
106.9698	106.9689	0.9	C ₆ Cl
246.8449	246.8443	0.6	C ₆ Cl ₅

分子イオンを内部標準イオンとして使用することで、フラグメントイオンの精密質量を精度良く得ることが出来た。

3. まとめ

AccuTOF GC では 1 つの内部標準イオンによる 1 点ドリフト質量校正により精密質量が得られる。内部標準イオンは質量既知のものであればその種類を選ばないので、磁場型 MS と比べて測定操作は容易になる。さらに今まで困難であった EI 法以外のイオン化法 (CI、FI、FD 法) での精密質量測定も簡便に行うことが可能となる。