

---

# Thermo Scientific Exactive

---

## 電場型フーリエ変換質量分析計



---

対応イオン化法

ESI, APCI

---

通常測定質量範囲

m/z 100~2,000

---

通常設定分解能

50,000  
(m/z200基準, 半値幅)

---

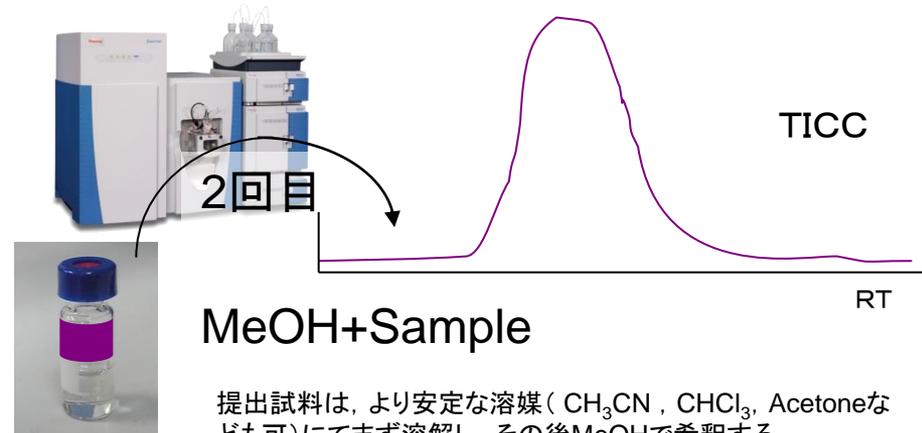
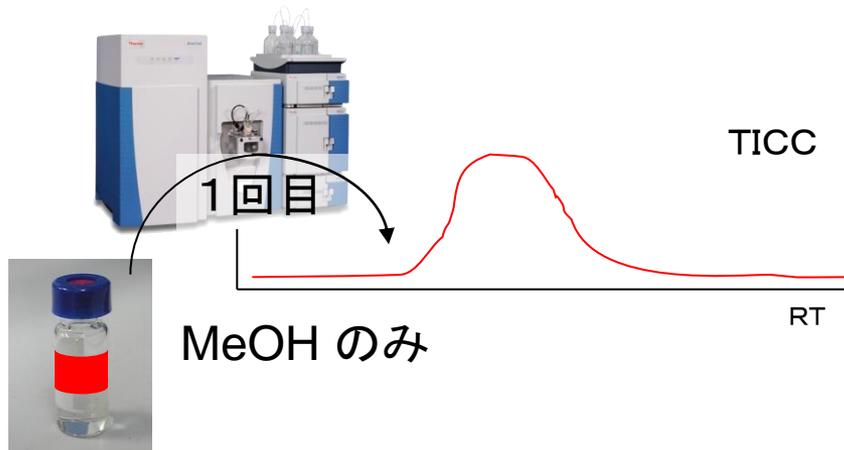
通常質量精度

<5ppm(外部標準)

---

# 測定の流れ

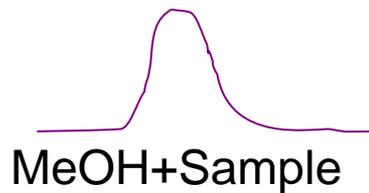
1サンプルにつき BG測定+Sample測定 の 2回1セット で行う。



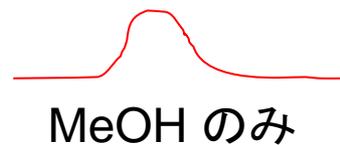
提出試料は、より安定な溶媒 (  $\text{CH}_3\text{CN}$  ,  $\text{CHCl}_3$  , Acetone など可 ) にてまず溶解し、その後 MeOH で希釈する。

万一 MeOH にて変性してしまった場合でも、MeOH を使用しない方法に変更して再検討することができるように配慮。

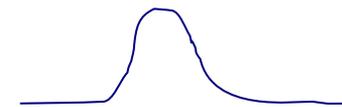
バックグラウンドを差し引いたデータ処理



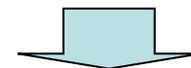
—



=



バイアル, 試薬由来のBGを含む

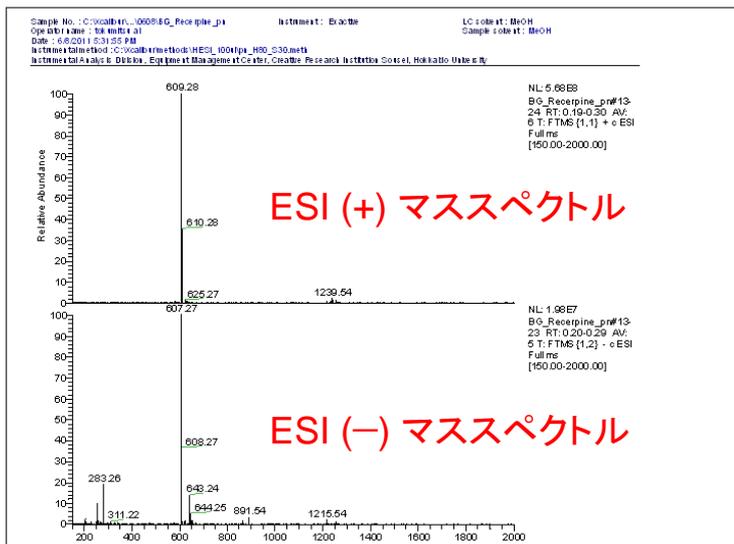


スペクトルデータ結果表示

# 返却データ様式

(スペクトル測定結果・精密質量測定結果)

## スペクトル測定 & 精密質量測定結果-1



このほか、スペクトル測定 of 拡大データを添付することがあります。

## 精密質量測定結果-2

Elemental composition search on mass 609.28028

m/z= 604.28028-614.28028

Isotope Min Max

N-14 0 10

O-16 0 10

C-12 0 50

H-1 0 100

Na-23 0 1

Charge 1

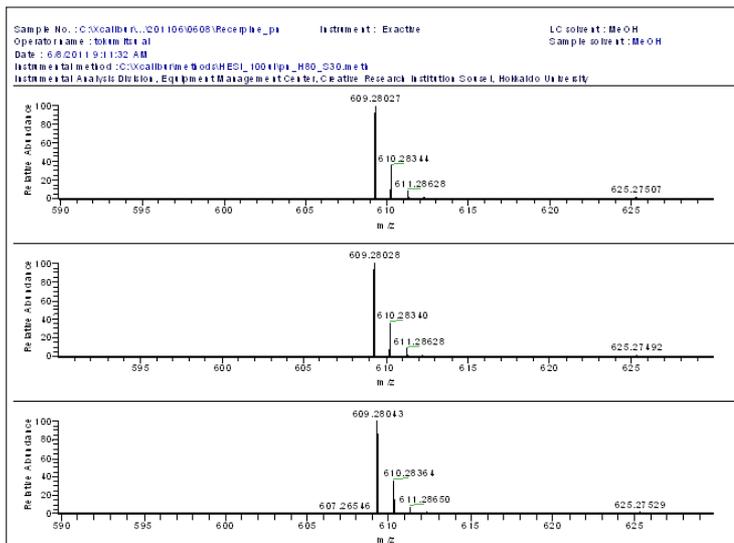
Mass tolerance 5.00 ppm

Nitrogen rule not used

RDB equiv -1.00-100.00

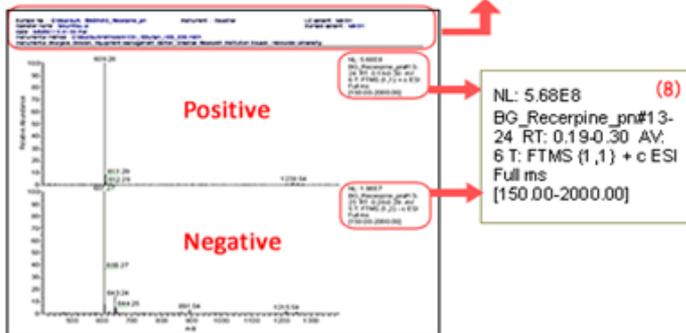
max results 20

m/z	Theo. Mass	Delta (ppm)	RDB equiv.	Composition
609.28028	609.28065	-0.61	20.0	C32 H35 O4 N9
	609.28066	-0.62	14.5	C33 H41 O9 N2
	609.28093	-1.06	21.5	C33 H34 O N10 Na
	609.28093	-1.07	16.0	C34 H40 O6 N3 Na
	609.27959	1.13	16.5	C32 H38 O5 N6 Na
	609.27931	1.58	15.0	C31 H39 O8 N5
	609.27881	2.42	27.5	C45 H37 O2
	609.28199	-2.81	19.5	C34 H37 O5 N6
	609.28227	-3.27	21.0	C35 H36 O2 N7 Na
	609.28227	-3.27	15.5	C36 H42 O7 Na
	609.27825	3.33	11.5	C31 H42 O9 N2 Na
	609.27825	3.34	17.0	C30 H36 O4 N9 Na
	609.27797	3.79	15.5	C29 H37 O7 N8
	609.27746	4.62	28.0	C43 H35 O N3



# ヘッダーの読み方

- (1) Sample No. : C:\calibur\...10506\BG\_230000\_sample\_pn (5) Instrument : Exactive (6) LC solvent : MeOH  
 Operator name : tokumitsu ai (7) Sample solvent : MeOH  
 (2) Date : 6/8/2011 5:31:55 PM  
 (3) Instrumental method : C:\calibur\methods\HESI\_100ul\pn\_H80\_S30\_meth  
 (4) Instrumental Analysis Division, Equipment Management Center, Creative Research Institution, Hokkaido University



\* ESI-MS,APCI-MSは溶媒に溶解する必要があります。使用溶媒によっては対象試料が安定に存在できない場合も考えられます。

\* 使用溶媒の種類については、特に注意してご確認下さい。

\* 極性溶媒中の安定度を時間単位で教えていただけると助かります。

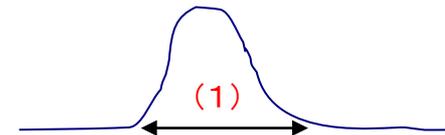
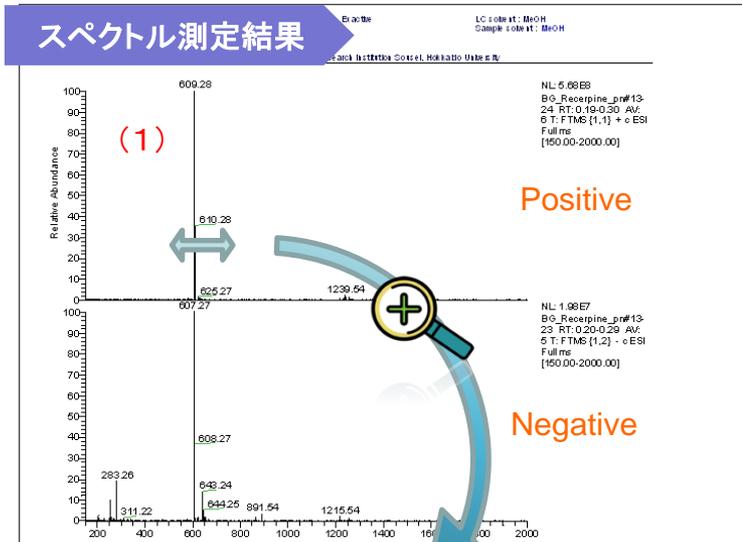
\* Exactiveでは flow injection 法を用いています。初めに提出試料を溶解するときは、より試料が安定に存在できる溶媒を選択しますが、測定時に希望調整する際は、MeOHを用います。ご注意さい。

- (1) サンプル情報 (詳細は下記参照) (5) 装置名  
 (2) 測定日 (6) 測定時LCにて使用した溶媒 (試料を希釈した溶媒)  
 (3) 測定時の条件 (詳細は下記参照) (7) 提出試料管に入れた溶媒 (試料を溶解した溶媒)  
 (4) 機関名 (8) 実測定記録情報 (詳細は下記参照)

<p>(1) サンプル情報</p> <p>BG_230000_sample_pn ① ② ③ ④</p> <p>① バックグラウンド減算データの表記 (減算していないデータにはBGが付かない)          ② 受付No.          ③ サンプル名          ④ pn: positive/negative 同時測定の意          pn → ESI, pna → APCI</p>	<p>(3) 測定時の条件</p> <p>H80_S30_meth ① ②</p> <p>① Tube lens voltage (V)          ② Skimmer voltage (V)</p>	<p>(8) 実測定記録情報</p> <p>NL: 5.68E8          BG_Recerpine_pn#13-24 RT: 0.19-0.30 AV: 6 T: FTMS (1,1) + c ESI Full ms [150.00-2000.00]          ① ② ③ ④</p> <p>① +: positive測定、 -: negative測定          ② c: セントロイド型、 p: プロファイル型          ③ イオン化モード          ④ 測定したFullRange</p>
--	---	---

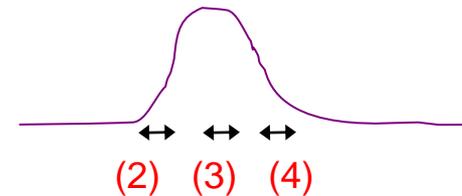
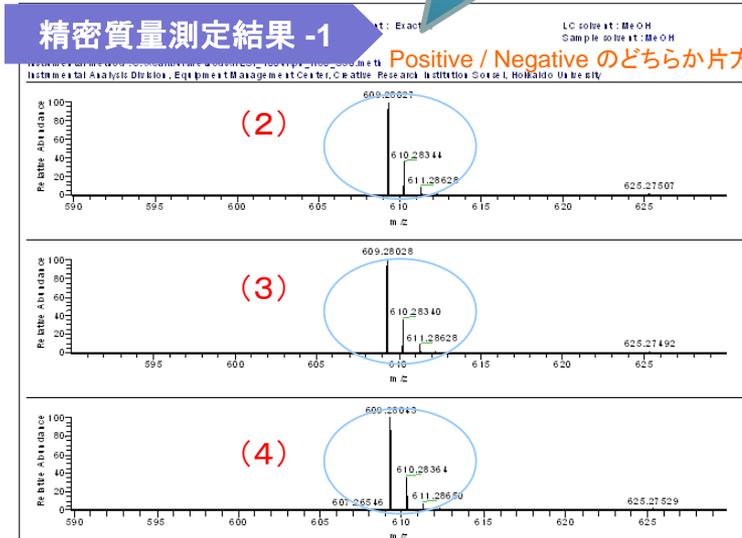
# データの読み方

(スペクトル測定結果・精密質量測定結果-1)



15スペクトル程度の平均スペクトルデータ

- ・バックグラウンド(溶媒、使用バイアル由来)の減算処理済み
- ・15スペクトル程度の平均値(小数点以下2桁)
- ・広範囲表示



- (2) 前半5スペクトル程度の平均スペクトルデータ
- (3) 中間5スペクトル程度の平均スペクトルデータ
- (4) 後半5スペクトル程度の平均スペクトルデータ

このうちひとつ数値を用いて組成演算を行い、結果を印字します。

- ・(組成演算するため)減算処理無し
- ・5スペクトル程度の平均値(小数点以下5桁)
- ・目的ピーク付近の拡大表示

# データの読み方

(精密質量測定結果-2)

```
Elemental composition search on mass 609.28070  
m/z= 604.28140-614.28000  
Isotope Min Max  
N-14 0 5  
O-16 0 10  
C-12 0 100  
H-1 0 200  
Charge 1  
Mass tolerance 10.00 ppm  
Nitrogen rule not used  
RDB equiv -1.00-100.00  
max results 10
```

m/z	Theo. Mass	Delta (ppm)	RDB equiv.	Composition
609.28140	609.28066	1.22	14.5	C <sub>33</sub> H <sub>41</sub> O <sub>9</sub> N <sub>2</sub>
	609.28334	-3.18	19.0	C <sub>36</sub> H <sub>39</sub> O <sub>6</sub> N <sub>3</sub>
	609.27931	3.42	15.0	C <sub>31</sub> H <sub>39</sub> O <sub>8</sub> N <sub>5</sub>
	609.27881	4.26	27.5	C <sub>45</sub> H <sub>37</sub> O <sub>2</sub>
	609.28468	-5.38	18.5	C <sub>38</sub> H <sub>41</sub> O <sub>7</sub>
	609.27746	6.46	28.0	C <sub>43</sub> H <sub>35</sub> ON <sub>3</sub>
	609.28602	-7.58	23.5	C <sub>39</sub> H <sub>37</sub> O <sub>3</sub> N <sub>4</sub>
	609.28736	-9.78	23.0	C <sub>41</sub> H <sub>39</sub> O <sub>4</sub> N

目的ピークの実測値

組成演算結果

- ① 含有元素組成の指定.
- ② Charge の指定.
- ③ 許容誤差範囲を設定.
- ④ 窒素ルールを設定.
- ⑤ 化合物の不飽和度を設定.