
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

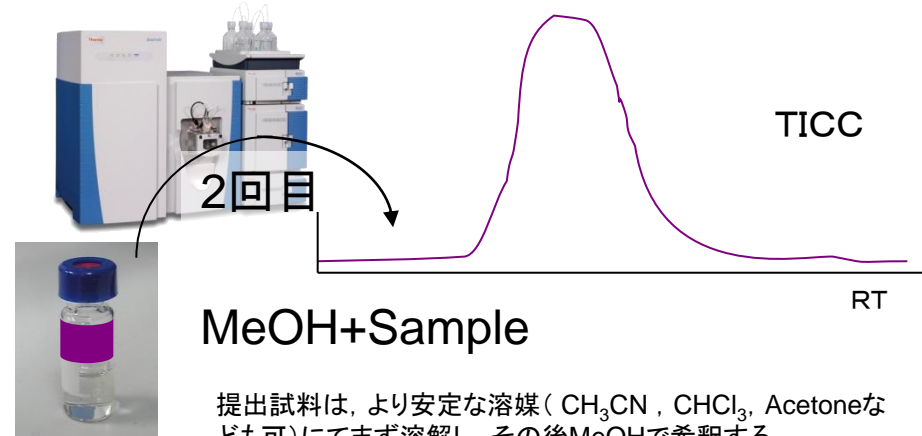
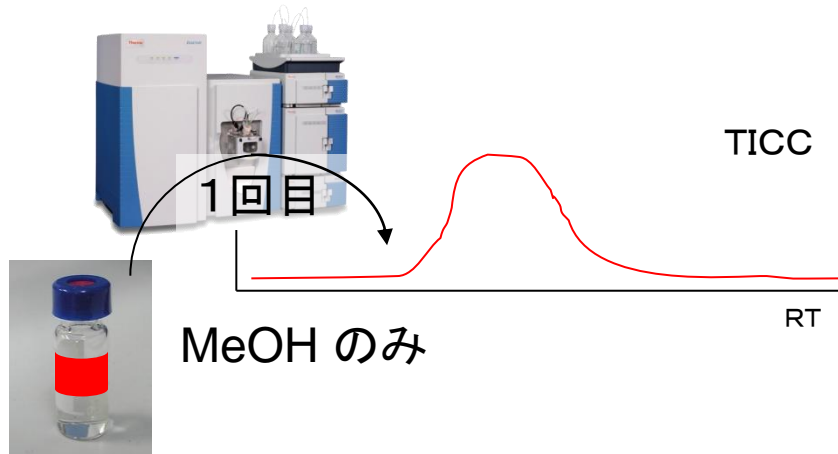
50,000
(m/z200基準, 半値幅)

通常質量精度

<5ppm(外部標準)

測定の流れ

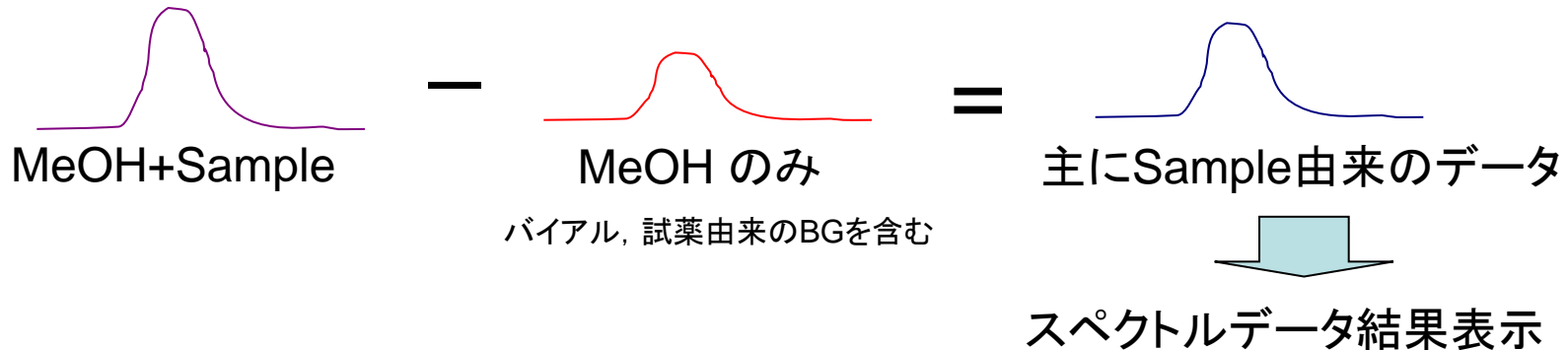
1サンプルにつき BG測定+Sample測定 の 2回1セット で行う。



提出試料は、より安定な溶媒 (CH_3CN , 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。

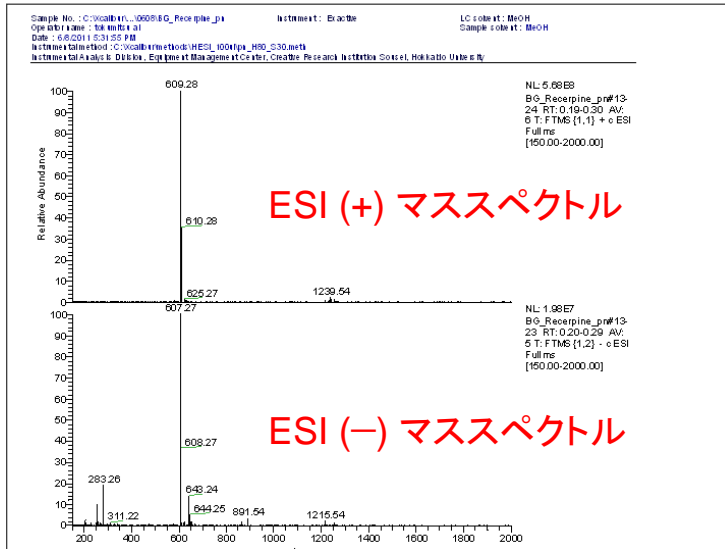
バックグラウンドを差し引いたデータ処理



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

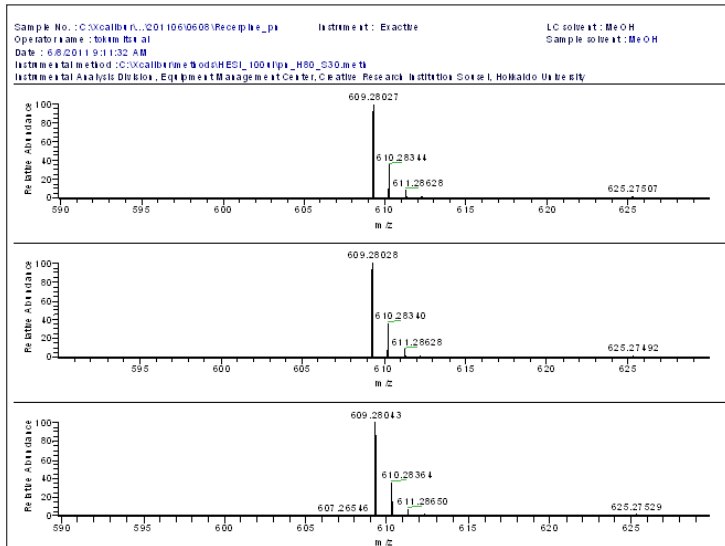
Mass tolerance 5.00 ppm

Nitrogen rule not used

RDB equiv -1.00-100.00

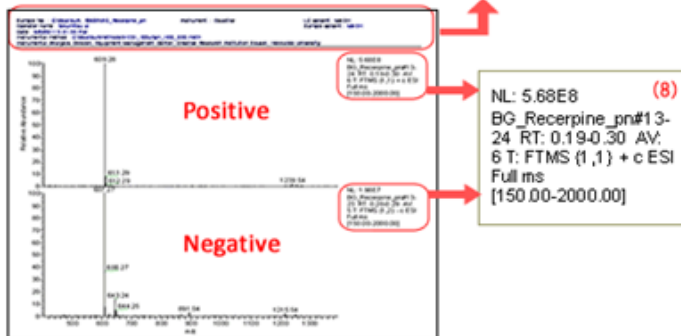
max results 20

m/z	Theo. Mass	Delta (ppm)	RDB equiv.	Composition
609.28028	609.28065	-0.61	20.0	C32H35O4N9
	609.28066	-0.62	14.5	C33H41O9N2
	609.28093	-1.06	21.5	C33H34ON10Na
	609.28093	-1.07	16.0	C34H40O6N3Na
	609.27959	1.13	16.5	C32H38O5N6Na
	609.27931	1.58	15.0	C31H39O8N5
	609.27881	2.42	27.5	C45H37O2
	609.28199	-2.81	19.5	C34H37O5N6
	609.28227	-3.27	21.0	C35H36O2N7Na
	609.28227	-3.27	15.5	C36H42O7Na
	609.27825	3.33	11.5	C31H42O9N2Na
	609.27825	3.34	17.0	C30H36O4N9Na
	609.27797	3.79	15.5	C29H37O7N8
	609.27746	4.62	28.0	C43H35ON3



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。

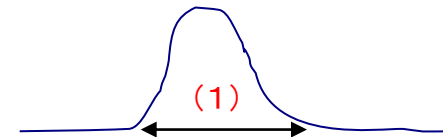
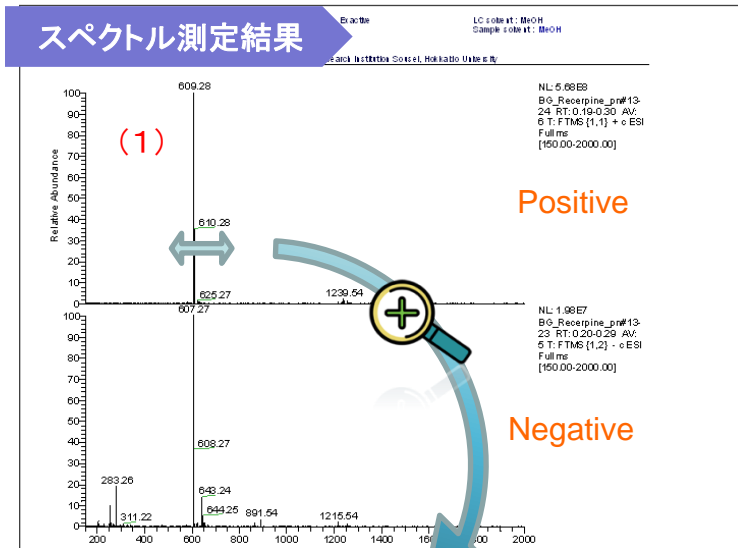
* Exactiveでは flow injection 法を用いています。初めに提出試料を溶解するときは、より試料が安定に存在できる溶媒を選択しますが、測定時に希望調整する際は、MeOHを用います。ご注意さい。

- (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>
--	---	---

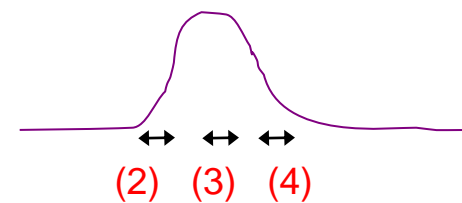
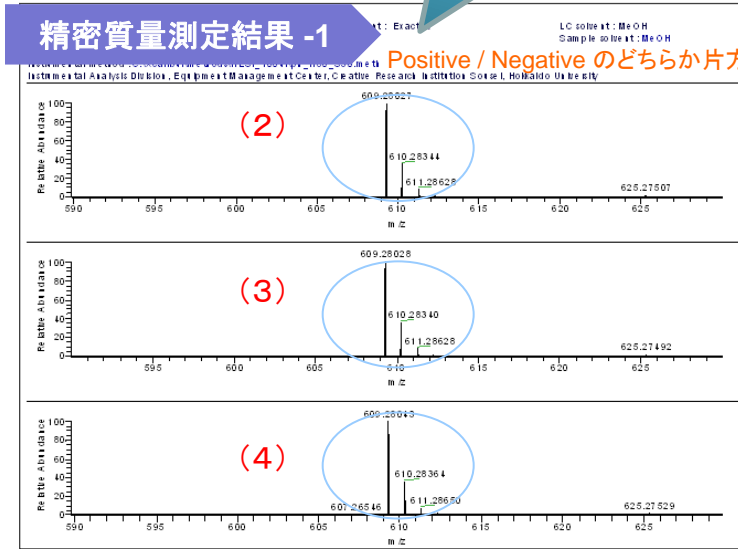
データの読み方

(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)

- 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.

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 ₃₃ H ₄₁ O ₉ N ₂
	609.28334	-3.18	19.0	C ₃₆ H ₃₉ O ₆ N ₃
	609.27931	3.42	15.0	C ₃₁ H ₃₉ O ₈ N ₅
	609.27881	4.26	27.5	C ₄₅ H ₃₇ O ₂
	609.28468	-5.38	18.5	C ₃₈ H ₄₁ O ₇
	609.27746	6.46	28.0	C ₄₃ H ₃₅ ON ₃
	609.28602	-7.58	23.5	C ₃₉ H ₃₇ O ₃ N ₄
	609.28736	-9.78	23.0	C ₄₁ H ₃₉ O ₄ N

目的ピークの実測値

組成演算結果