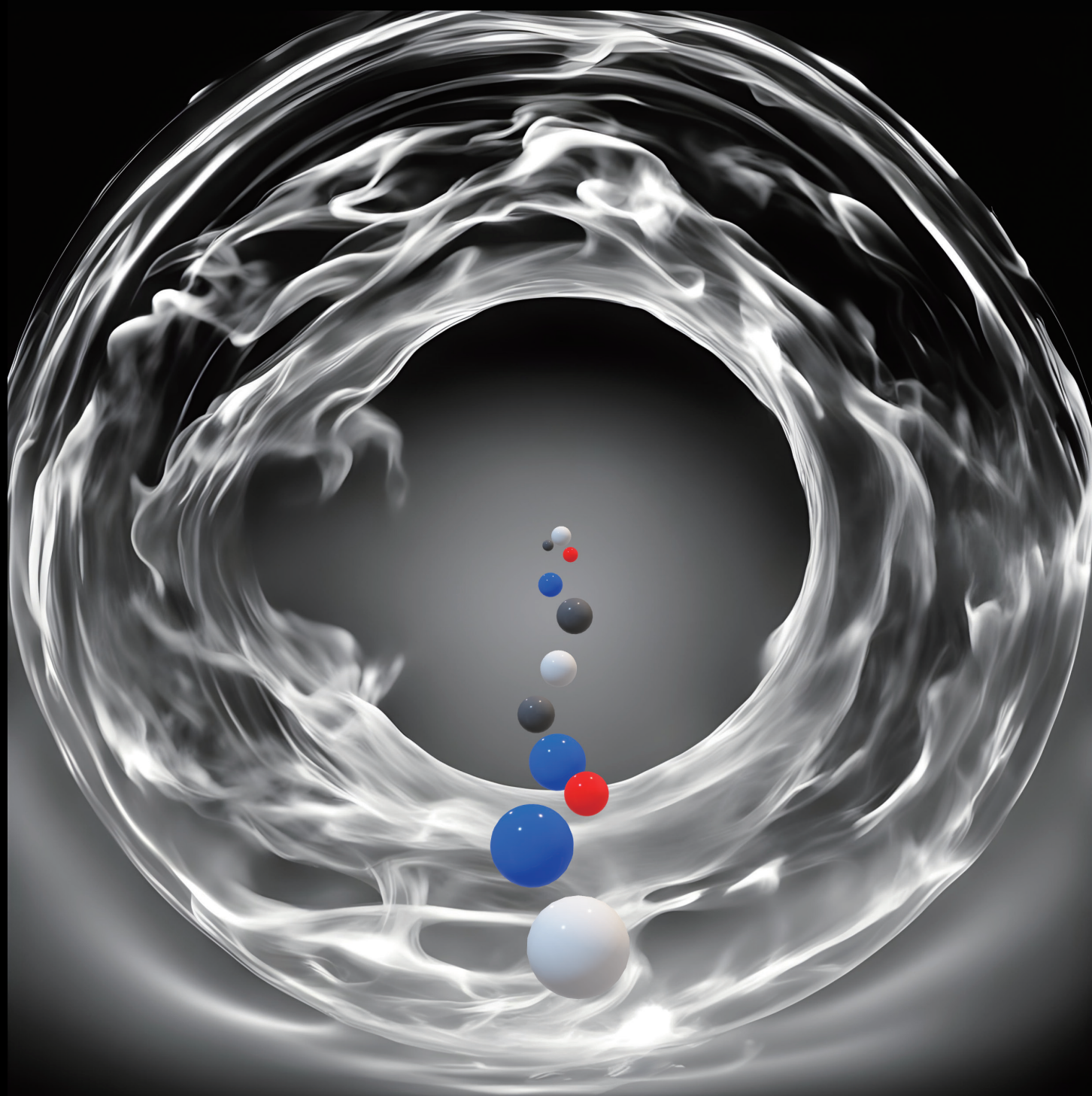


ぶんせき ④

Bunseki 2024

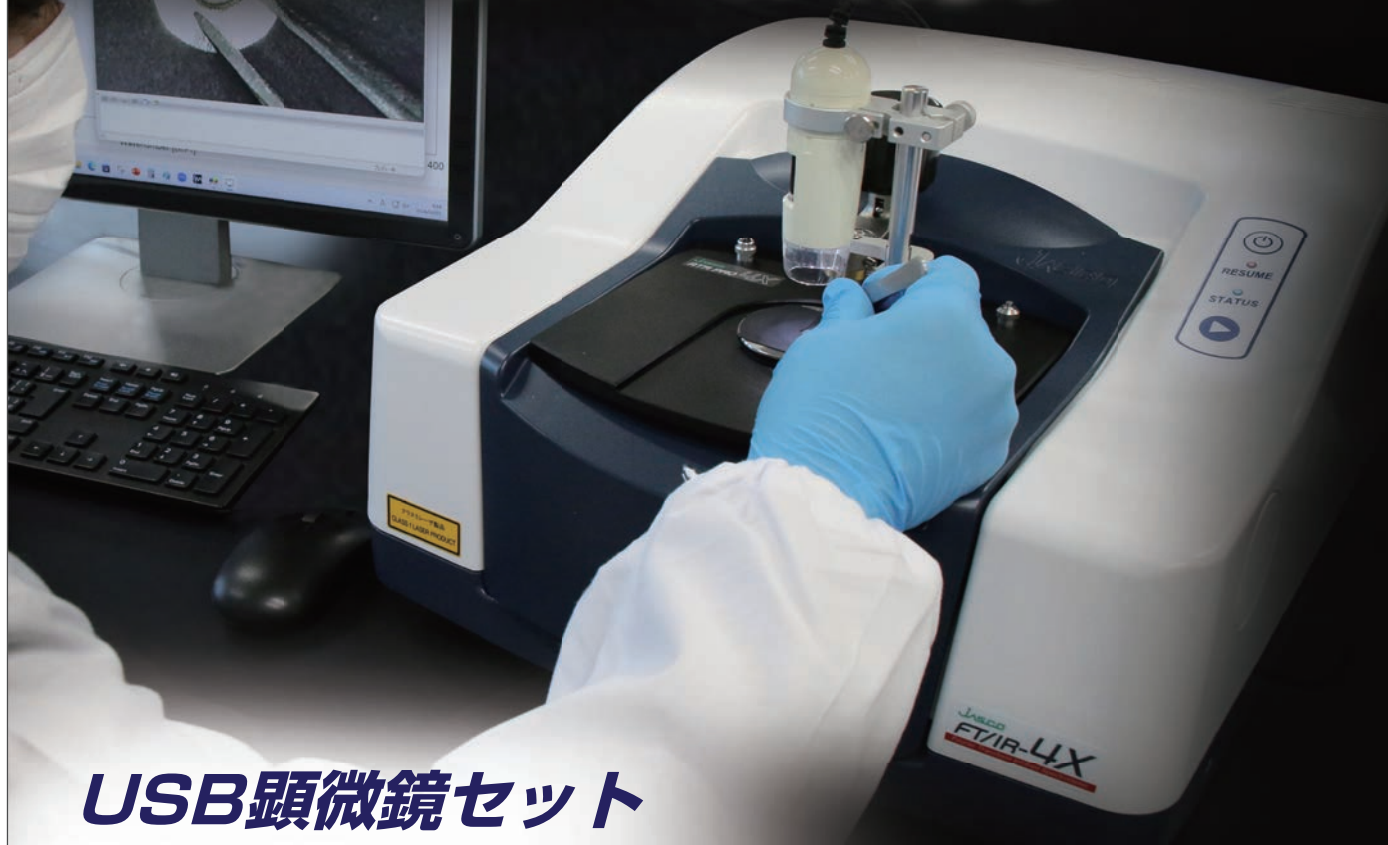
The Japan Society for Analytical Chemistry



日本分析化学会

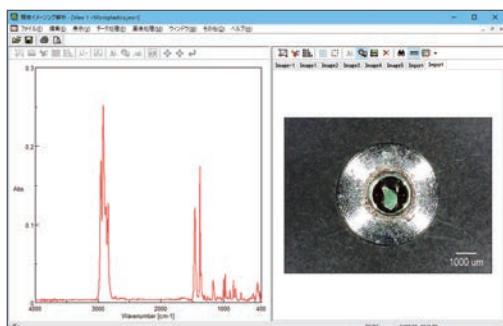
<https://www.jsac.jp>

サンプル画像を ATRプリズム上で見る



USB顕微鏡セット

USB顕微鏡セットは、測定前のサンプル画像をATRプリズム上で取得し、スペクトルと画像データを一つのファイルに保存可能です。スペクトルマネージャーでサンプルサイズの計測も行え、小さなサンプルも拡大された観察画像で取扱えます。



スペクトルと画像をセットで保存

「スペクトル」、「ATRプリズムに密着したサンプル画像*」、「USB顕微鏡で取得した密着前のサンプル画像」を、一つのファイルに保存できます。

* ATR PRO 4X VIEW の場合



特長

- ・移動の手間削減：測定前に試料画像をATRプリズム上で取得
- ・作業が簡単：小さな試料も拡大された観察画像で取扱いが簡単
- ・確実な紐付け：スペクトルと画像データを1つのファイルに保存
- ・便利な機能：ソフトウェア上で試料サイズを計測

光と技術で未来を見つめる

日本分光

日本分光株式会社

〒192-8537 東京都八王子市石川町2967-5
TEL 042(646)4111(代)
FAX 042(646)4120

日本分光の最新情報はこちらから

<https://www.jasco.co.jp>

日本分光HP



JASCO

Jascoは日本分光株式会社の登録商標です。
本広告に記載されている装置の外観および各仕様は、
改題のため予告なく変更することがあります。



ガスクロマトグラフ質量分析計
GCMS-QP2050

Excellence Redefined



分析業務を取り巻く事業環境やニーズは時代とともに大きく変わってきています。

GCMS-QP2050は、島津製作所が誇る技術を集約した、これからも時代をリードする新世代のガスクロマトグラフ質量分析計です。圧倒的な信頼性と安定性を誇るハードウェアと、優れた操作性と卓越した自動化技術を搭載したソフトウェアにより、新しい価値を提供します。

Minimum Maintenance, Maximum Progress

最小限のメンテナンスで最大限の成果

Simple Operation, Confident Results

シンプルな操作で確実な分析結果

One Instrument, Infinite Possibilities

1台の装置に無限の可能性

詳しい製品情報はこちら



ムロマックミニカラムの使用例(公開論文・文献より)

1. 環境分野：海水、雨水など環境試料の分析用途
2. 鉱業分野：岩石、鉱物、石英などの組成分析
3. 農業分野：植物などの分析
4. 生化学分野：タンパク質、生体などの精製研究
5. 原子力分野：高レベル廃棄物の処理法研究(詳細はお問い合わせください)

ムロマック[®] ミニカラム

ムロマック[®]ミニカラムはカラムと液溜槽がポリプロピレンにより一体成型されていて、丈夫で耐薬品性に優れています。小さなカラムながら濾槽が効率良く試料中の物質を吸着できるように設計されており、リークやテリングの少ない精度の高いクロマトグラフィーが可能です。

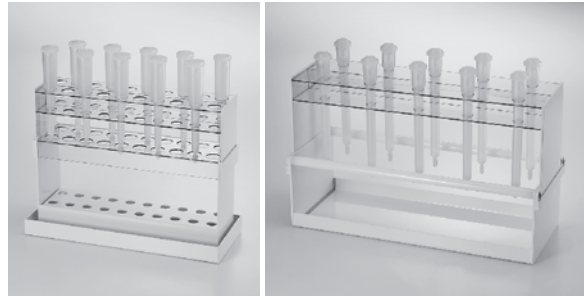


種類	内径(mm)	長さ(mm)	容量(mL)	液溜槽容量(mL)
S	5.0~5.5	50	1.0	8.0
M	6.5~8.5	5.8	2.5	10.0
L	10.0~11.0	118	10.0	5.0 ^{*1}

*1. 連結キャップを使って50ml注射器を接続すると便利です。

ムロマック[®] ミニカラムスタンド

カラムSまたはM用のスタンドは、直径15~16.5mm、長さ100~165mmの試験管を20本立てることができます。カラムL用スタンドのトレイには100mLのビーカー又は三角フラスコを10個並べることができます。



種類	横(cm)	縦(cm)	高さ(cm)	立数
S・M共用	26.5	7.0	20.5	20本
L用	36.5	14.5	22.5	10本

ムロマック[®] ガラスカラム

ムロマック[®]ガラスカラムはガラス製で耐薬品性に優れ、鮮明にイオン交換反応を可視化します。イオン交換樹脂の初期検討後、樹脂量を多くして使用することでより正確なデータを取ることが可能です。枝管付きタイプはムロマック分液ロートを使用することで液枯れしません。また、ライフ試験など樹脂層高を上げて試験を行う場合は細長カラムを使用することで正確なデータを取得できます。



種類	横(cm)	縦(cm)	容量(mL)
S	8	28	30.0
M	8.5	32.5	100.0
ロング	5	43	40.0

ムロマック[®] 分液ロート

[各ガラスカラム対応]

ムロマック[®]分液ロートはガラス製で耐薬品性に優れ、ムロマック[®]ガラスカラム(S・M・ロング各種)に互換性のあるすり合わせ規格を有しています。



種類	容量(mL)
S	500
M	1000

お問合せ先

室町ケミカル株式会社 <https://www.muro-chem.co.jp>

[東京] TEL. 03-3525-4792 [大阪] TEL. 06-6393-0007 [本社] TEL. 0944-41-2131



FRONTIER LAB

パワフル粉碎とシンプル操作の卓上可搬型

新製品

迅速凍結粉碎装置 IQ MILL-2070

機器分析の試料前処理に最適 - 各種試料の粉碎・攪拌・分散に特化

IQ MILL-2070 の特長

● 使いやすいシンプル操作

- ✓ 簡単な操作でサンプルの粉碎が可能
設定項目は、粉碎速度、粉碎時間、サイクル数、サイクル間の停止時間です。回転ノブとタッチパネルで簡単に設定できます。

● 短時間で効率的に微粉碎

- ✓ パワフルな衝撃と剪断力で粉碎時間を数秒へ大幅短縮
高弾性ベルトを用いた高速上下ねじれ®運動による粉碎方式を採用しており、試料の迅速粉碎が可能です。 特許第7064786号
- ✓ 粉碎時の静かな作動音
粉碎時に発生する音は55 dB程度で通常会話を妨げません。
- ✓ 同一プログラムで最大3試料の同時粉碎が可能
最大3本の試料容器が収納可能なホルダーを搭載しており、より効率的な粉碎が可能です。

● 省エネの試料冷却キット付属

- ✓ 液体窒素の消費量は300 mL程度 (試料と粉碎子入りの試料容器1個の場合)
標準付属の試料冷却キットには冷媒容器、 tong、試料冷却ホルダーが含まれます。
- ✓ 冷媒を使わない室温粉碎も可能

通常会話を妨げない
静音設計



仕様

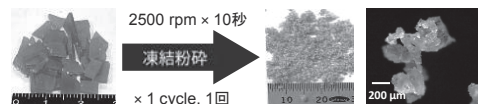
粉碎温度	室温あるいは冷媒（液体窒素等）を用いる試料冷却	
粉碎設定	回転数 (rpm)	50 から 最大 3000 (無段階設定)
	回転時間 (秒)	10 から 60 (10 秒毎)
	回転サイクル間の待ち時間 (秒)	10 から 600 (10 秒毎)
	回転サイクル数	1 から 10 (1サイクル毎)
安全装置	マイクロスイッチと手動ロック方式による誤動作防止	
本体寸法、重量	幅 270 × 奥行 340 × 高さ 300 (mm), 約 12 kg	
電源 (50/60 Hz)	AC 100/120 V あるいは 200/240 V (450 VA)	

高速上下ねじれ®運動



試料容器内における粉碎子の高速上下ねじれ®運動により試料を短時間で効率的に粉碎します。

粉碎例：ポリイソブレン (0.53 g)



40種以上の粉碎応用例をウェブサイトから閲覧可能！

フロンティア・ラボ 株式会社

ご購入検討時にテスト粉碎を承ります。お気軽にお問い合わせください。
www.frontier-lab.com/jp info@frontier-lab.com



高性能の熱分解装置と金属キャピラリーカラムの開発・製品化に専念して、洗練された製品をお届けしています



多彩な機能で品質管理や 研究開発をサポート

自動滴定装置

AUT-801



2系列同時滴定に対応

デュアルシステム



2系列の滴定画面を同時に表示に対応

シングルシステム時は、
600データを本体にメモリー可能

各種滴定法に合わせた電極類をご用意

ターンテーブル(オプション)接続による
省力化を実現



広範な分野での分析ニーズにお応えします

食品分野

化学・分析分野

メッキ分野

電気・鉄鋼・金属分野

環境分野

石油分野

薬品・化粧品・香料分野



食品



石油



薬品・化粧品・香料

東亜ディーケーケー株式会社

<https://www.toadkk.co.jp/>

本社 / 〒169-8648 東京都新宿区高田馬場1-29-10 TEL.03(3202)0219

●東京:03(3202)0226 ●大阪:06(6312)5100 ●札幌:011(726)9859 ●仙台:022(353)6591 ●千葉:0436(23)7531
●名古屋:052(485)8175 ●広島:082(568)5860 ●四国:087(831)3450 ●九州:093(551)2727



LC-CollectIR

LC-CollectIRは、高い効率にGPCで分離された成分から移動相溶媒を蒸発させ溶質成分のみをFTIR用の「Geディスク」、PyroGC/MS用の「熱分解試料カップ」またはMALDI-MS用「ステンレスディスク」に捕集するシステムです。GPCにより分離された混合物の各成分についてオフラインでの測定が可能になります。FT-IR分光測定やMALDI-MSにより簡単に迅速な分子量分布における共重合体の組成変化解析や、PGC/MSによる構造解析の研究に最適です。さらに簡易分取装置として使用できるため、従来の分取法と比べ、大幅な時間短縮とコストの削減が可能になります。

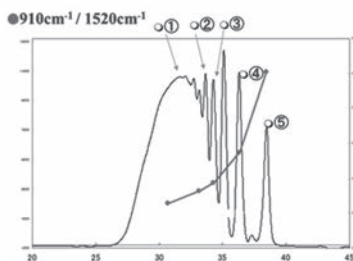


応用例

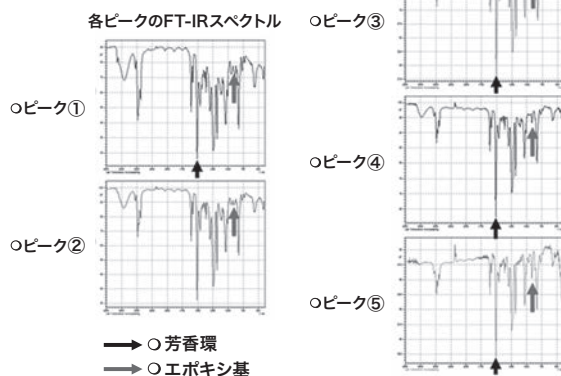
- 混合物の分離と各成分の簡単に迅速な構造解析
- 樹脂の末端や内部構造の推定
- 分子量分布における、共重合体の組成変化
- 分子量が近似した物質の分子構造の区別
- 微細構造解析および樹脂の混合系の判別
- 簡易分取装置としての利用

GPC-IR測定

BPA型エポキシ樹脂のFTIRによる組成分析



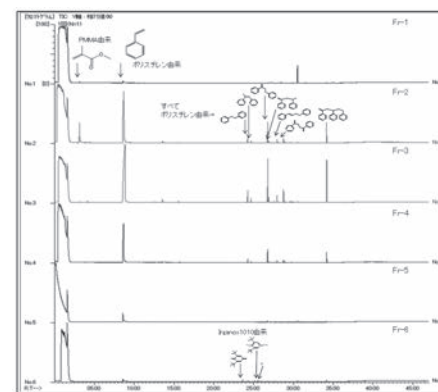
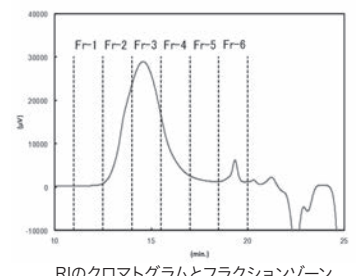
本システムでは、GPCフラクション毎の赤外スペクトルを測定可能です。得られたスペクトルから官能基の比等をクロマトグラムにオーバーラップさせた解析も可能です。



GPC-PyroGC/MS測定

ポリマーブレンドと添加剤の測定

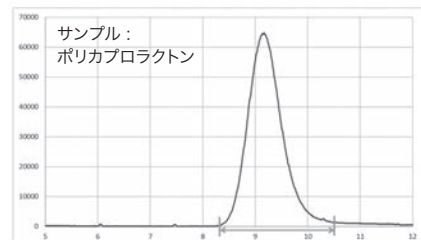
GPCからのフラクションを熱分解装置用試料カップにトラップする事で、GPCの溶出時間ゾーン毎にPyroGC/MS測定が可能となります。得られたスペクトルの解析により、使用されているポリマーの種類や割合が解ります。また、数%程しか使用されていない添加剤の特定も可能です。



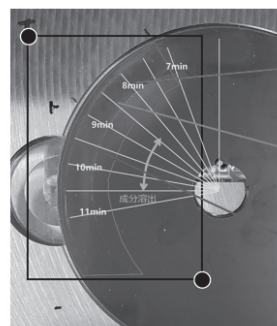
各分取フラクションの熱分解GC/MS結果

GPC-MALDI-MS測定

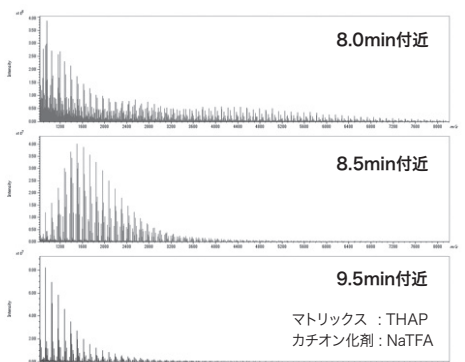
MALDI-MSイメージング測定



GPCからステンレスプレートに直接サンプリングした上からマトリックス溶液とカチオン化剤溶液を混合してスプレーし、MALDI-TOFMSによりマスマイミメージング測定を実施しました。



データは日本電子製JMS-S3000にて取得



機械学習による高速液体クロマトグラフィーの保持時間予測

高速液体クロマトグラフィーの保持時間の予測は、チャレンジングな課題である。これは、試料、固定相、移動相間の相互作用が単一ではなく、複数の相互作用から成り立っているからである。汎用的なシリカ系の C18 固定相の主な相互作用は、疎水性相互作用である。しかし、その表面にわずかに存在する酸性の官能基であるシラノール基と異なる相互作用が働く。中性からアルカリ性の移動相において、陽イオン交換能が生じ、酸性の移動相においては、水素結合が生じる。これにより、保持の遅延が生じる場合がある。さらに、C18 の官能基密度、基材シリカの比表面積や細孔径により保持は大きく異なる。つまり、同じ C18 カラムでもブランドやメーカーが異なれば、保持時間の予測は困難である。

Choi¹⁾らは、液体クロマトグラフィー質量分析法 (LC/MS) により試料をダンシルクロリドで誘導体化したダンシル化合物の保持時間予測モデルを開発した。化合物の誘導体化により、C18 カラムとダンシル基との疎水性相互作用の影響が相対的に大きくなる。これにより、保持時間の予測精度を高めた。このベースとなるのは、315 種のダンシル化合物を分析し、得られた保持時間と分子記述子計算ソフトウェアである mordred²⁾ から算出された記述子である。保持時間を用いて記述子を 1613 から 58 に絞り込み、機械学習モデルを構築した。さらに、LC/MS の精密質量を利用することで、未知化合物の同定を強力にサポートした。これらにより、ダンシル化合物の保持時間を予測するためのグラフィカルユーザーインターフェース (GUI) を備えたスタンドアロンのソフトウェアを開発することに成功した。この保持時間予測モデルは、使いやすい GUI に組み込まれており、精密質量とともに未知の保持時間を持つターゲットのダンシル化代謝物の識別に使用することができる。開発したソフトウェアが健康な妊娠女性の尿サンプルから薬物の代謝物を識別するのに役立つことが示された。

このような機械学習の技術による保持予測は、複雑なデータセットを処理し、ほとんどのクロマトグラフィー技術で化合物の同定と分離という重要なタスクを容易にする能力であり、今後も指数関数的に成長する。

- 1) E. Choi, W. J. Yoo, H.-Y. Jang, T.-Y. Jamg, S. K. Lee, H. B. Oh : *J. Chromatogr. A*, **1705**, 464167 (2023).
- 2) H. Moriwaki, Y. Tian, N. Kawashita, T. Takagi : *J. Cheminform.*, **10**, 4 (2018).

〔化学物質評価研究機構 坂牧 寛〕

温故知新：キャピラリー電気泳動による

医薬品とタンパク質との相互作用解析

医薬品と血漿タンパク質との相互作用は、薬物動態や薬力学に大いに影響する。このため、医薬品開発において定量的かつ定性的な相互作用解析は重要である。定量的な相互作用解析には、液体クロマトグラフィー、表面プラズモン共鳴法、等温滴定型カロリメトリーをはじめ実に様々な手法を利用可能である。

これら手法の中で、キャピラリー電気泳動 (capillary electrophoresis, CE) は、平衡論に基づく定量的な相互作用 (結合定数) 解析が可能であり、(1) リガンド/アクセプターの固定化を要せず、少ない試料消費量で相互作用を解析可能である。(2) 試料が混合物の場合でも、成分分離が可能であれば、混合物中の各成分との相互作用解析が可能である。(3) mobility shift assay, frontal analysis をはじめ様々な相互作用解析法および解析例がある。という特徴を有している¹⁾。

Deeb らのグループはこの様な CE の特徴に着目し、血清アルブミン (serum albumin, SA) を用いて、医薬品エナンチオマーの分離、そして SA と医薬品エナンチオマーとの結合定数の評価を mobility shift assay にて評価している²⁾。Amlodipine および Verapamil 両エナンチオマーを SA によって分離後、SA と Amlodipine のエナンチオマーとの結合定数 (K_a) の解析に成功した (K_a : 2.2×10^4 , 2.5×10^4 [M^{-1}])。一方、Verapamil に関しては相互作用が極端に弱いため、エナンチオマー分離を達成したが、理論式に従う測定結果を得られなかったと報告している。この結果から、CE の mobility shift assay は、 $K_a > 10^4$ [M^{-1}] の弱い相互作用を解析可能であると判断できる。

1980 年代以降、CE に関する基礎研究が始まり、40 年近く経た現在、CE による相互作用解析は完成された感が筆者にあった。しかし、今回紹介した CE による結合定数の解析に加え、結合サイト数の解析や、CE による速度論解析も報告されている³⁾。また、ソフトウェアによるデータ処理の高性能化は⁴⁾、CE による相互作用の解析精度の向上、ならびに測定から解析までのスループット化も可能だと考えられる。この様な状況および、CE による相互作用解析の例は枚挙に暇がないほどであることを考えると、今後、CE をベースとする新規の相互作用解析法、既存の相互作用解析法の高性能化、CE による相互作用解析例の益々の増加が期待される。

- 1) M. Olabi, M. Stein, H. Wätzig : *Methods*, **146**, 76 (2018).
- 2) R. Rati, H. Wätzig, M. Stein, S. E. Deeb : *J. SepSci.*, **43**, 3960 (2020).
- 3) A. T. H. Le, S. M. Krylova, S. N. Krylov : *Anal. Chem.*, **91**, 8532 (2019).
- 4) P. Dubský, M. Ůrdögová, M. Malý, M. Riesová : *J. Chromatogr. A*, **1445**, 158 (2016).

〔大阪大学大学院基礎工学研究科 岡本 行広〕