

ぶんせき ③

Bunseki 2026

The Japan Society for Analytical Chemistry





粉末X線回折データベースPDF-4 Axiomとサポートソフトウェアセット

PDF-4 Axiom 3年間または6年間固定の粉末X線データベースライセンス

- ICDD PDF-4データベースから常温を中心に114,000+件をエントリー*
- 84,200+件に原子座標*
- 84,800+件にI/Ic値*
- 基本的な鉱物のエントリー
- Sieve+ (単一物質としてのPhase ID用) のみ付随
(DDViewer+は付きません。そこでMatch!の検索機能を使います。)

*下記のPDF Statsを参照して下さい

PDF Statistics (2026) Data Entry Source	PDF-5+2026 & PDF-5+Server Edition 2026	PDF-4/ Axiom 2026	PDF-4/ Minerals 2026	PDF-2 2026
00-ICDD	128,710	39,886	13,546	128,710
01-FIZ	104,327	14,517	15,772	229,628
02-CCDC	542,265	0	0	0
03-NIST	2,825	365	232	10,067
04-MPDS	291,868	59,285	25,315	0
05-ICDD Crystal Data	56,218	0	75	869
Total No. of Entries	1,126,213	114,053	54,940	369,274
Subfile Distribution:				
Inorganics	472,395	101,152	54,292	313,504
Organics	657,753	13,050	789	57,261
New Entries		4,075	1,715	9,867
Rietveld-No. with atomic coordinates	651,210	84,264	45,633	0
Reference Intensity Ratio (RIR)- I/Ic	1,022,606	84,870	43,380	265,704
Experimental Digital Patterns	22,238	10,532	329	0

Match! + Diamond

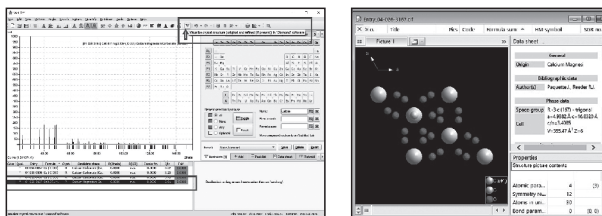
- 回折生データやテキストファイルからデータをインポートしてプロファイルフィッティング、3強線、ピーク位置、元素、名称他のパラメータ検索
- テキスト、Bruker、PANalytical他の生データ、ピークデータのインポート
- Match!の検索結果からPDF番号でDiamondを起動して結晶構造を可視化。
印刷、保存、CIFとしてエクスポートが可能

※ Axiomには約30%のエントリーに原子座標が入っています。

※ CIFフォーマットの多様性のため、ソフトウェア側で結晶構造を表示できないこともあります。

■セット内容 (ライセンス期間 商品形態)

- PDF-4 Axiom (3年間または6年間固定のライセンス USB key)
- + Match! (永久ライセンス ダウンロード)
- + Diamond (永久ライセンス ダウンロード)
- + システムサポート



■セット価格

- PDF-4 Axiomが3年間ライセンスのセット価格 一般価格 ¥1,595,000 (教育価格¥1,155,000)
- PDF-4 Axiomが6年間ライセンスのセット価格 一般価格 ¥2,695,000 (教育価格¥1,980,000)

※表示価格は税込です。

PDF-4 Axiomの製造元はICDD (米)。Match!とDiamondの製造元はCristal Impact (独)。

株式会社 **デジタルデータマネジメント**

〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル
TEL:03-5641-1771 FAX:03-5641-1772
E-mail:tech@ddmcorp.com URL:http://www.ddmcorp.com

未知試料へ多面的にアプローチ

発生ガス分析や瞬間熱分析などの組み合わせにより
未知試料を多面的に熱分解GC/MS分析

前処理なしで迅速に分析

あらゆる形態のポリマー試料を煩雑な前処理なしで
簡単・迅速に分析

高性能で高信頼

サーモグラムとパイログラムの高い再現性を保証

豊富な周辺装置

目的に合わせて選べる周辺装置で分析業務をサポート



微量ポリマーの検出感度が大幅向上！
**スプリットレス熱分解用オプション装置
MFS-2015E**



キャピラリーGC分析における中・高沸点領域の
ピーク形状を大幅改善！
スマートプレカラム **NEW**



試料水中のマイクロプラスチックを簡単に捕集！
捕集から測定までスムーズな操作を実現
Smart 微粒子コレクター **NEW**



迅速凍結粉碎装置 IQ MILL-2070

簡単操作！扱いやすい卓上型の粉碎装置

静かな作動音 … 周辺での会話が可能（粉碎時の騒音参考値 55 dB）

短時間 & パワフルに粉碎 … 高速上下ねじれ運動による効率的な粉碎

試料に合わせた細かな条件設定 … 粉碎速度/時間/サイクル数の設定
種類豊富な粉碎子と容器

液体窒素消費量が少なく省エネ … 液体窒素の最小消費量は約300 mL

DNA抽出用に細胞破碎を効率化する専用モデルもございます

高分子材料や生体試料などの
粉碎・攪拌・分散に最適



製品情報

BAS

光学式酸素モニター



FireSting O2-C 酸素モニター(4ch)

接続するセンサータイプを入れ替えることで、基本機能の光学式酸素モニタリング測定の外に光学式温度測定が可能な測定装置です。上位機種^①のFireSting Proは加えてpH測定も可能です。

- 一台で最大4チャンネル対応。項目の組合せは自由
- 気相および液相での測定に利用できます
- 酸素濃度測定用のセンサーには通常用と低濃度用があります
- 非接触型など様々なタイプのセンサーをラインナップ

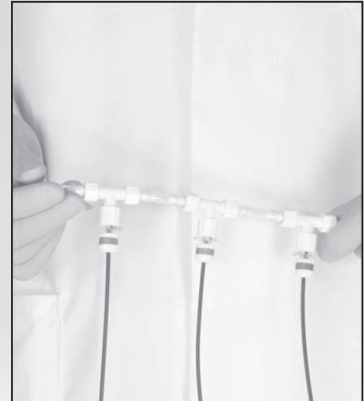
ミニプローブを
溶液中に挿して...



密閉容器内の酸素濃度や
温度の測定に...



フローセルタイプで
流体の測定に...



BAS

分光電気化学システム

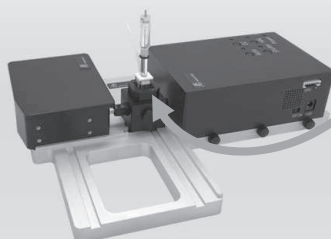


スペクトロメーターシステムがリニューアル!!

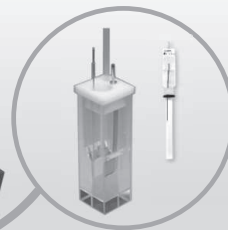
- 従来品より高感度、光源強度も増強



モデル3325
バイポテンシオスタット



【新製品】SEC2 I 20
スペクトロメーターシステム



SEC-CT
石英ガラス製光電気化学
セルキット+参照電極

電気化学的な挙動と
分光スペクトル変化を
同時に測定できる
システムです。

- 製品の外観、仕様は改良のため予告なく変更される場合があります。

BAS ビー・イー・エス株式会社

各種光学式酸素センサーや光ファイバー等のアクセサリはホームページでご確認下さい!!

本社 〒131-0033 東京都墨田区向島 1-28-12
東京営業所 TEL: 03-3624-0331 FAX: 03-3624-3387
大阪営業所 TEL: 06-6308-1867 FAX: 06-6308-6890

セミナー講演内容などビー・イー・エス株式会社の最新情報はメールニュースで随時配信しております。配信ご希望の方はお気軽にお問合せ下さい ⇒ E-mail: sp2@bas.co.jp

【ア行】
 ヴァーダー・
 サイエнтиフィック(株)……表紙4
 (株)エス・ティ・ジャパン……A5
【カ行】
 (一社)化学情報協会……表紙3
【サ行】
 (株)島津製作所……表紙2

西進商事(株)……カレンダー裏
 (株)ゼネラルサイエンス
 コーポレーション……A2
【タ行】
 (株)デジタルデータマネジメント……A6
【ナ行】
 日本分光(株)……A3

【ハ行】
 ビー・エー・エス(株)……A12
 フリッチュ・ジャパン(株)……A7
 フロンティア・ラボ(株)……A11
【ラ行】
 (株)リガク……A1
製品紹介ガイド……A8~9

分析試料の前処理作成用粉碎機

FRITSCH GERMANY



ドイツ フリッチュ社製

ミニミル P-23



- ナノ粒子を1-2分で作成
- 処理量0.1-5mlの少量試料作製に最適
- 重量7kg、寸法20×30×30cmと極めて小型
- 容器。ボールの材質はジルコニア、ステンレス、プラスチック
- 研究室だけでなく、DCを使って外部での使用も
- 更に、グローブボックス内での使用も可能
- マイクロチューブにも対応。Max 2ml×6個

ドイツ フリッチュ社製

遊星型ボールミル Classic Line P-7



- Fritsch 伝統の遊星型ボールミルの小型タイプ
- 容器のサイズは45ml、または12ml。2個搭載可能
- 容器、ボールの材質はメノウ、ジルコニア等7種類
- ポット回転数はMax1,600rpmの強力パワー
- 試料作製だけでなく、本機目的の研究開発用機器としてもご使用いただけます

カタログおよび価格表は弊社にお問い合わせください

フリッチュ・ジャパン株式会社

本社 〒231-0023 横浜市中区山下町252
 大阪営業所 〒532-0011 大阪市淀川区西中島7-2-7
 福岡営業所 〒819-0022 福岡市西区福重5-4-2

info@fritsch.co.jp <https://www.fritsch.co.jp>

Tel (045)641-8550 Fax (045)641-8364
 Tel (06)6390-0520 Fax (06)6390-0521
 Tel (092)707-6131 Fax (092)707-6131

キャピラリー電気泳動に関連する略号

1 はじめに

キャピラリー電気泳動 (CE) は高性能液相分離分析法として利用されている。分離系の特徴や分離機構に基づき次のような各種分離モード、(1) キャピラリーゾーン電気泳動 (capillary zone electrophoresis, CZE), (2) 動電クロマトグラフィー (electrokinetic chromatography, EKC), (3) キャピラリーゲル電気泳動 (capillary gel electrophoresis, CGE), (4) キャピラリー等電点電気泳動 (capillary isoelectric focusing, CIEF), (5) キャピラリー等速電気泳動 (capillary isotachopheresis, CITP), に分類される場合が多い。

2 CE の化学現象解析機能

高速液体クロマトグラフィー (HPLC) とは異なり、多くの場合 CE の分離場であるキャピラリー内には分離剤等は存在しない。しかし、CE ではキャピラリー内における様々な化学現象 (化学反応や物質移動現象等) を利用して分離機能の発現や分離効率の向上を図っている。そのため CE 系の分離挙動はキャピラリー内における化学現象の特徴を反映している。このことは逆に、CE 系の分離挙動を解析することにより、キャピラリー内における化学現象に関する化学的情報が取得できる可能性を示唆している。CE は高性能分離分析法として利用されているが、化学現象解析に関する優れた分析能力をも有している。CE の原理から最新技術に亘る様々な各種情報に関する詳細な解説記事が既に本誌に掲載されている¹⁾。そこで本拙稿では、CE の化学現象解析機能に焦点を絞り、関連情報について概説する。

3 ACE

Affinity capillary electrophoresis (ACE) は試料成分との親和性を有する物質を泳動液中に存在させ、その物質との反応性の差に基づき試料成分を分離する CZE の一様式である。ACE は分子間相互作用の平衡定数測定法としても既に広く利用されている。分子間相互作用の解析には表面プラズモン共鳴法や蛍光相互相関分光法等が利用されているが、これらの方法では実験データ測定の際に分子の固定化や蛍光標識化が必要であり、分子間相互作用の解析結果に対するこれらの影響が強く懸念される。一方、ACE 系では実験データ測定の際に分子の固定化や蛍光標識化が不要であり、分子間相互作用をより正確に解析できる。分子間相互作用の速度論的解析も可

能な解析法が開発されている。

3・1 KCE

Kinetic capillary electrophoresis (KCE) は均一系における分子間相互作用の速度論的解析法を開発する上での概念的な基盤技術として提案された²⁾³⁾。実験データを測定するための様々な実験操作法、Nonequilibrium capillary electrophoresis of equilibrium mixtures (NECEEM) 等が考案されているが、これらの各種実験法により観測される CE 挙動はすべて同一の基礎式で表わされ、初期条件や境界条件だけが実験操作ごとに異なる。KCE では各種の実験操作・条件の下で測定された実測溶出曲線と計算溶出曲線が一致するように curve-fitting 法により会合・解離の平衡定数や速度定数を決定する。

3・2 MASKE

Macroscopic approach to studying kinetics at equilibrium (MASKE) は化学平衡状態における親和性複合体の会合・解離速度定数の測定法として提案された⁴⁾⁵⁾。一般的には、平衡状態にある ACE 系に摂動を加えて非平衡状態を作り出し、この摂動に対する実測応答曲線が計算曲線と一致するように curve-fitting 法により会合・解離速度定数を決定する。遅い平衡到達を仮定して物質移動に関する基礎式を解くことにより、分子間相互作用の平衡到達速度が遅い ACE 系に対して curve-fitting を必要としない近似的解析法も提案されている⁶⁾。

3・3 ACE - モーメント解析法

CE 分離挙動の解析には HPLC 系の解析理論の考え方が多々準用される。モーメント理論による分離挙動の解析結果は HPLC 系の既往の解析理論に基づく解析情報に比べ、種類や数量および定量性の点でより優れている。特に、既往の解析理論では不可能であった分離系内における化学反応や物質移動現象の速度論的解析の実施にモーメント理論は有効であり、CE 実験データからの拡散係数、物質移動係数や反応速度定数等の定量的な導出がその適用により初めて可能になる。

ボロン酸による cis-diol 構造を有する糖認識反応の解析に「ACE - モーメント解析法」が適用され、会合平衡定数や会合・解離速度定数が決定された⁷⁾。また、モーメント理論を適用して既往論文中の ACE データを解析した結果、論文発表時には求められていなかった会合・解離速度定数を決定することが可能であった。この結果は過去に集積された膨大な数量の ACE データを速

度論的解析のデータベースとして活用できる可能性を示している。また、Complete filling ACE だけではなく Partial filling ACE データを解析するためのモーメント式も開発され、解析理論基盤が構築されている⁸⁾。

4 EKC

EKC は界面活性剤ミセルやリボソーム等の分子集合体を擬似固定相として使用する CE 分離モードである。擬似固定相への分配平衡の差に基づき各試料成分を分離する方法であり、分離機構は HPLC に類似している。

4.1 ミセル動電クロマトグラフィー (MEKC)

Micellar electrokinetic chromatography (MEKC) では陰イオン性のドデシル硫酸ナトリウム (SDS) ミセルが最も頻繁に使用される。その他に陽イオン性・両イオン性・非イオン性界面活性剤のミセルやマイクロエマルジョン等も使用される。主に電氣的に中性の試料成分がミセルへの分配平衡の差に基づき分離される。

SDS ミセルを使用する MEKC 系の分離挙動がモーメント理論に基づき解析され、SDS ミセル界面における物質透過現象が平衡論的および速度論的観点から研究された⁹⁾。バルク泳動液とミセルとの間での溶質の分配平衡定数だけではなく、ミセル界面における溶質のミセルへの出入り両方向の透過速度定数の測定が可能になった。さらに、Partial filling MEKC による実験データの解析に必要なモーメント理論基盤が構築され、この方法も SDS ミセルの界面物質透過現象の解析に適用された¹⁰⁾。Partial filling MEKC による界面物質透過現象の解析結果は通常の Complete filling MEKC による解析結果⁹⁾と一致し、その有用性が実証された。

4.2 リボソーム動電クロマトグラフィー (LEKC)

Liposome electrokinetic chromatography (LEKC) 系の分離挙動をモーメント解析することにより、リボソームの脂質二分子膜における溶質の透過現象に関する平衡論的・速度論的情報を得ることが可能になった。物質の膜透過性はこれまで並行人工膜透過性試験等により解析されているが、LEKC では人工膜ではなくリボソームそのものを擬似固定相として使用し、実際の脂質二分子膜を観測場とする。また、リボソームはリン脂質が弱い力に基づき自己集合した構造体である。そのため、リボソームには化学的・物理的作用をできる限り加えず、また固定化や蛍光標識化を施すことなく、リボソームが本来あるべき状態で実験データを測定する必要がある。リボソームを擬似固定相として使用する LEKC はこれらの要請に応える実験法である。

アシル基の構造特性 (炭素数や二重結合数) が異なるリン脂質を用いて調製した数種類のリボソーム各々を擬似固定相として使用する LEKC 系の分離挙動がモーメ

ント理論に基づき解析され、リボソームの脂質二分子膜における溶質の透過現象が平衡論的・速度論的に解析された¹¹⁾¹²⁾。本法では膜透過両方向の速度定数の測定が可能であり、脂質二分子膜の流動性やリン脂質の構造特性等との関連性を踏まえた膜透過の動特性に関する研究の展開への本解析法の寄与が期待される。

5 おわりに

CE はその分離挙動にかかわる化学現象を解析する上で原理的に優れた数多くの長を有する。すなわち、ACE 系では化学反応、一方 EKC 系では分子集合体への分配現象が自動的にかつ無数に繰り返されるため、関連化学情報を積算・増幅して検出することが可能である。また化学種の固定化や蛍光標識化が不要であり、高額な専用機器の使用や特殊実験技術の習得も不要である。このため ACE 系は分子間相互作用、EKC 系は物質移動現象の優れた解析システムと見なすことができる。それらの溶出曲線の解析にモーメント理論を適用することにより、分子間相互作用や分配現象に関する平衡定数だけではなく、化学反応や界面物質透過の速度定数を解析的に決定することが可能である。CE はこれまで主に高性能分離分析法として利用されてきたが、CE は化学現象解析法としての優れた特性と高い解析能力をも原理的に有する。CE 技術は各方面へと展開しているが¹⁾、化学現象解析機能の開発もまた CE の分析法としての総合力向上の一つの方向性を示している。

文 献

- 1) 齋藤伸吾：ぶんせき (Bunseki), **2023**, 390.
- 2) A. Petrov, V. Okhonin, M. Berezovski, S. N. Krylov : *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 10174 (2005).
- 3) S. N. Krylov : *Electrophoresis*, **28**, 69 (2007).
- 4) V. Okhonin, M. V. Berezovski, S. N. Krylov : *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 7062 (2010).
- 5) M. Kanoatov, L. T. Cherney, S. N. Krylov : *Anal. Chem.*, **86**, 1298 (2014).
- 6) L. T. Cherney, S. N. Krylov : *Anal. Chem.*, **83**, 1381 (2011).
- 7) K. Miyabe, M. Oya, M. Imaizumi : *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **97**, uoae104 (2024).
- 8) K. Miyabe : *J. Chromatogr. A*, **1684**, 463557 (2022).
- 9) K. Miyabe, S. Senoo, N. Okayasu : *Electrophoresis*, **40**, 2962 (2019).
- 10) K. Miyabe, M. Nakajima : *Electrophoresis*, **42**, 2528 (2021).
- 11) K. Miyabe, S. Inaba, M. Umeda : *J. Chromatogr. A*, **1687**, 463691 (2023).
- 12) K. Miyabe, M. Sakai, S. Inaba : *Electrophoresis*, **45**, 1885 (2024).

[立教大学理学部化学科 宮部 寛志]