

Orbitrap Exploris MX の導入初期評価 ～質量精度の安定性および設置環境の影響について～

○横野 瑞希

鳥取大学 技術部

1.はじめに

鳥取大学技術部では業務依頼を受けて全学共用設備の維持管理および依頼分析を行っており、筆者は質量分析装置を主に担当している。2025 年に装置の更新が実施され、学内利用開始前に装置の安定性および設置環境の影響についてモニタリング・評価した。本報告ではその評価内容について述べる。

2.装置

今回導入された装置は Thermo Fisher Scientific 社製 Orbitrap Exploris MX (図 1) である。本装置は 2010 年度に導入された同社製 Exactive の後継機として 2025 年に導入された。装置の設置場所は、質量分析装置を集約した共用機器室内とした。(図 2) メーカーによる導入時の説明では毎日のキャリブレーションが推奨された。しかし、本装置はユーザー自身での測定も想定しているため、休日も含めた毎日のキャリブレーションを管理者が実施することは現実的ではない。また、不特定多数の利用者によるプローブ交換やキャリブレーション操作は、運用上の負担や管理上の課題が生じる。本装置の主な学内利用者の利用目的は合成化合物の確認であり、分子量 200 から 1000 程度の化合物を 5 ppm 以内の質量精度で測定できることが求められる。先行機種 Exactive を一定期間継続運用できることとなったため、Orbitrap Exploris MX の利用開始を延期し、その期間に質量精度の経時変化およびそれに影響を及ぼす可能性がある装置周辺の温度を調査した。得られた結果に基づき、本学の装置環境下での適切なキャリブレーション頻度を検討した。



図 1. Orbitrap Exploris MX 外観

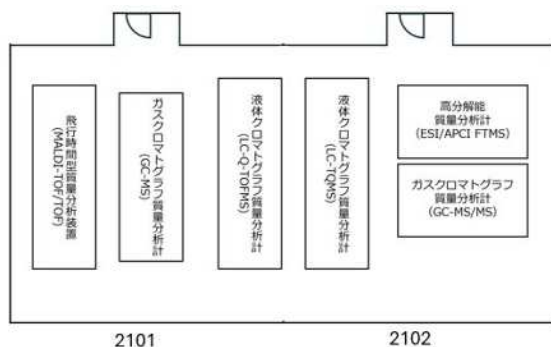


図 2. 質量分析室見取り図

3.方法

キャリブレーション試料には Thermo Fisher Scientific 社製 Flex Mix (Positive/Negative/High mass mode 用) を使用した。2025 年 2 月 10 日から 4 月 30 日の期間、“キャリブレーション”もしくは、質量較正を行わない“チェック”測定を平日毎日実施し、既定の m/z (163.0、319.0、363.0、602.0、1034.0、1334.0、1633.0、1733.0) から求められる root mean square (RMS) 誤差 (外部標準, ppm) を記録した。また、装置のログから 1 分間隔で記録されている基板温度データを取得した。

4.結果

全取得データのうち、2025 年 2 月 10 日から 3 月 4 日までの結果を抜粋し、キャリブレーション後の経過日数と RMS 誤差の関係を図 3 に示す。キャリブレーション後の RMS 誤差は経時的に徐々に増加する傾向が認められたが、24 日後においても 5 ppm 以内を維持した。また、キャリブレーション時とチェック測定時の基板温度差と RMS 誤差との関係を図 4 に示す。基板温度差は -6.4°C から 2.4°C の範囲で変動したが、温度差と RMS 誤差との間に明確な相関は認められなかった。以上より、本評価期間においては 24 日後において要求される質量精度を維持しており、本学の利用環境下では、キャリブレーション後少なくとも 2 週間以上の運用が可能であることが示された。

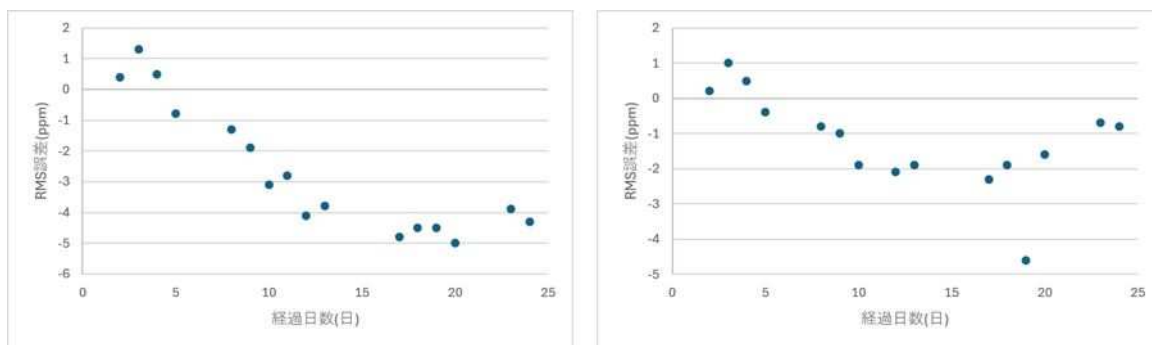


図 3. キャリブレーション経過日数と RMS 誤差 (左) ポジティブイオン (右) ネガティブイオン

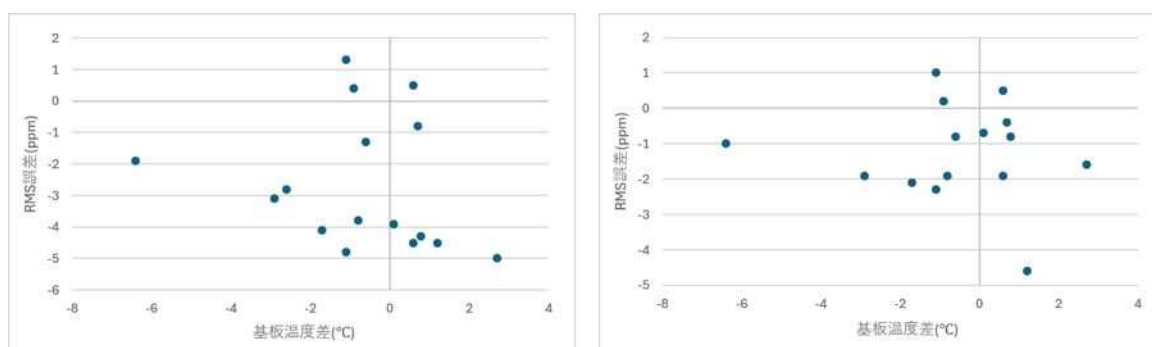


図 4. キャリブレーション時(基準)とチェック時の基板温度差と RMS 誤差 (左) ポジティブイオン (右) ネガティブイオン

5.おわりに

新規導入した Orbitrap Exploris MX について、学内利用開始前に装置の安定性および設置環境の影響を評価した。その結果、本学の利用環境および利用目的においては、メーカー推奨である毎日のキャリブレーションは必ずしも必要ではないことが明らかとなった。安全性を考慮して、現在は管理者が週 1 回の頻度でキャリブレーションを実施している。また、装置更新時に十分な評価期間を確保できたことで、装置性能および設置環境の影響を詳細に把握することができた。実運用環境下での評価結果に基づいて運用条件を設定することは、効率的かつ適切な装置管理に有用であると考えられた。

謝辞

本学の装置導入に携わった皆様、このような検討を行うことにご理解いただいた利用者の皆様のご協力に感謝いたします。