

LabSolutions™ LCMS用

# LC/MS/MS薬毒物データベース

乱用薬物、精神神経病用薬、医薬品、農薬、天然毒など、薬毒物分析で必要となる化合物を含むデータベースです。



LCMS-8060NX

## “Ready to Use Method”をご提供します

LC/MS/MS分析で必要となる分離条件の検討や各化合物に対するMSパラメータの最適化などの煩雑な作業をスキップして分析をはじめることができるため、多成分一斉分析業務を効率よく始めることができます。

## 7,000以上の薬毒物スペクトルを登録

2種類のHPLC分離条件をもとに、乱用薬物や精神神経用薬、医薬品などを含むMRM一斉分析メソッドおよびスクリーニング測定のために最適化されたシンクロナイズドサーベイスキャン（MRMの強度を閾値としたプロダクトイオンスペクトル採取条件）を有するメソッドを提供します。

さらに、登録化合物のモノイソトピック質量、化学式、CAS番号などを記載したデータシートも含まれており、測定したい薬毒物を簡単に検索することが可能です。

### ODSカラムを用いた分析条件

|        |   |
|--------|---|
| 分析カラム  | : Phenomenex Kinetex XB-C18<br>(2.1 mmI.D.×100 mmL, 2.6 μm) |
| ガードカラム | : Phenomenex SecurityGuard Ultra C18 2.1 mmI.D.用            |
| 移動相A   | : 10 mmol/L ギ酸アンモニウム+0.1% ギ酸 - 水                            |
| 移動相B   | : 10 mmol/L ギ酸アンモニウム+0.1% ギ酸 - メタノール                        |
| 流速     | : 0.3 mL/min  |
| カラム温度  | : 40 °C   |
| 分析時間   | : 15分   |

## MS/MSスペクトルを合成したマージスペクトルにより同定精度が向上します

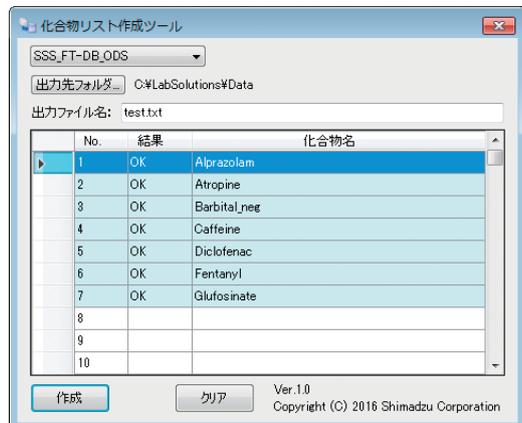
同定精度をすばやく確認するために、濃度などの定量処理の結果とともにマージスペクトルとライブラリスペクトルの類似度が表示されます。マージスペクトルは、1つのMRMに対して3つの異なるコリジョンエネルギー（CE）のシンクロナイズドサーベイスキャンから得られたMS/MSスペクトルを合成したスペクトルです。マージスペクトルを用いることで、より高精度な同定結果の確認が可能です。

### Biphenylカラムを用いた分析条件

|       |  |
|-------|--|
| 分析カラム | : Restek Raptor Biphenyl<br>(2.1 mmI.D.×100 mmL, 2.7 μm) |
| 移動相A  | : 2 mmol/L ギ酸アンモニウム+0.002% ギ酸 - 水                        |
| 移動相B  | : 2 mmol/L ギ酸アンモニウム+0.002% ギ酸 - メタノール                    |
| 流速    | : 0.3 mL/min (11 ~ 14分間は0.5 mL/min)                      |
| カラム温度 | : 50 °C  |
| 分析時間  | : 17分  |

# LC/MS/MS 薬毒物データベース

## 化合物リスト作成ツールによるメソッド作成



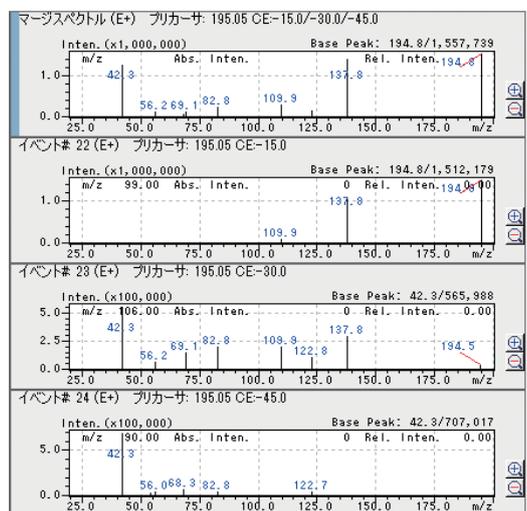
データベースに付属している「化合物リスト作成ツール」を用いることで、測定したい薬毒物を含むメソッドを簡単に作成することが可能です。



| タイプ         | イベント# | +/- | 化合物名 m/z                    | 時間 (0.000 min - 8.348 min) |
|-------------|-------|-----|-----------------------------|----------------------------|
| MRM         | 5     | +   | Caffeine 195.10/138.05, 195 |                            |
| トプロダクトイオンスキ | 6     | +   | > CE-15.0, 20.00/205.10     |                            |
| トプロダクトイオンスキ | 7     | +   | > CE-30.0, 20.00/205.10     |                            |
| トプロダクトイオンスキ | 8     | +   | > CE-45.0, 20.00/205.10     |                            |
| MRM         | 9     | +   | Atropine 290.15/124.15, 290 |                            |
| トプロダクトイオンスキ | 10    | +   | > CE-15.0, 20.00/300.15     |                            |
| トプロダクトイオンスキ | 11    | +   | > CE-30.0, 20.00/300.15     |                            |
| トプロダクトイオンスキ | 12    | +   | > CE-45.0, 20.00/300.15     |                            |
| MRM         | 13    | +   | Fentanyl 337.20/185.10, 337 |                            |
| トプロダクトイオンスキ | 14    | +   | > CE-15.0, 20.00/347.20     |                            |
| トプロダクトイオンスキ | 15    | +   | > CE-30.0, 20.00/347.20     |                            |

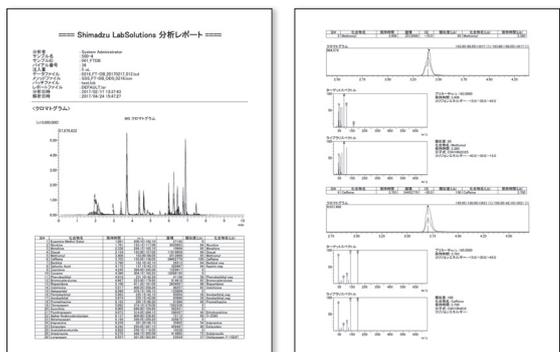
シンクロナイズドサーベイスキャン  
(3つの異なるコリジョンエネルギーを設定したプロダクトイオンスキャンを含む)

## マージスペクトルによる化合物同定



3つの異なるコリジョンエネルギー (CE) から得られるMS/MSスペクトルを合成したマージスペクトルを用いることで、薬毒物の同定を容易にし、かつ高精度な結果を得ることが可能です。

マージ  
スペクトル  
  
各CEから得られた  
MS/MSスペクトル



マージスペクトルによるライブラリ検索結果

### 注意事項

1. LabSolutions LCMSは Ver. 5.109以降、LabSolutions Insight™は Ver. 3.8SP1以降が必要です。
2. 本メソッドパッケージは研究用です。臨床診断用途で使用することはできません。
3. 本製品で得られる定性および定量情報は、確認のために標準試料を用いた試験を実施してください。

LabSolutions、LCMSおよびLabSolutions Insightは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。

なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。  
本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。  
治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。  
トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。  
外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

# 株式会社 島津製作所

分析計測事業部 604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1  
<https://www.an.shimadzu.co.jp/>

|   |  |   |   |
|---|--|---|---|
| 東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631<br>(大学担当) (03) 3219-5616<br>(会社担当) (03) 3219-5622 | 郡山営業所 (024) 939-3790<br>つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511<br>(会社担当) (029) 851-8515 | 静岡支店 (054) 285-0124<br>名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521<br>(会社担当) (052) 565-7531 | 四国支店 (087) 823-6623<br>広島支店 (082) 236-9652<br>九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332<br>(会社担当) (092) 283-3334 |
| 関西支社 (官公庁・大学担当) (06) 6373-6541<br>(会社担当) (06) 6373-6556                       | 北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095<br>(会社担当) (048) 646-0081                         | 京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604<br>(会社担当) (075) 823-1603                         |   |
| 札幌支店 (011) 700-6605<br>東北支店 (022) 221-6231                                    | 横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106<br>(会社担当) (045) 311-4615                          | 神戸支店 (078) 331-9665<br>岡山営業所 (086) 221-2511                                     | 島津コールセンター ☎ 0120-131691<br>(操作・分析に関する相談窓口) IP電話等: (075) 813-1691                                      |