

# 食品分析における最新技術のご紹介

## “ 定量分析とノンターゲット分析へのアプローチ ”

日本食品化学学会 第32回総会・学術大会  
ランチオンセミナー

2026年7月24日

飯田 哲生

株式会社島津製作所

分析計測事業部 Solutions COE

# 目次

---

1. Nexera™ X4 “次世代UHPLCの設計思想と製品特長”
2. ノンターゲット解析ソフトウェア  
LabSolutions Insight™ Profilerのご紹介

# 目次

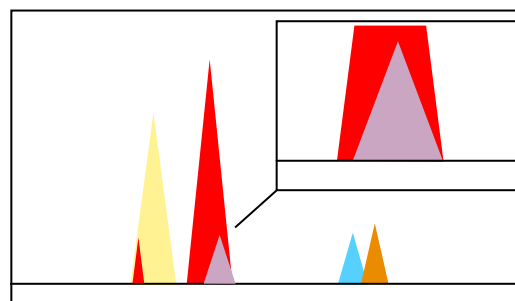
---

1. Nexera™ X4 “次世代UHPLCの設計思想と製品特長”
2. ノンターゲット解析ソフトウェア  
LabSolutions Insight™ Profilerのご紹介

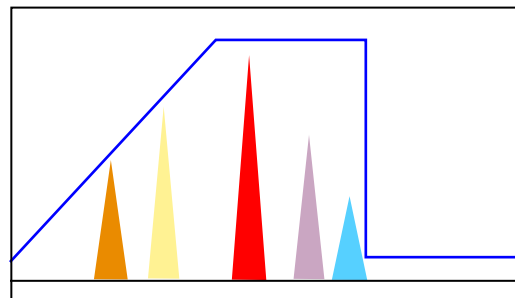
# 分析ラボの要求の変化

不純物管理厳格化・サンプル数増加・コスト削減 →UHPLCの導入が加速

## 従来の汎用HPLCによる分析

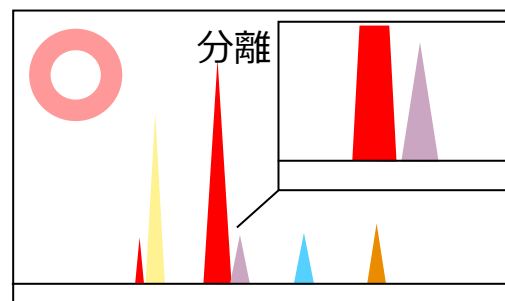


分離が不十分で  
未知の不純物を見逃すリスク

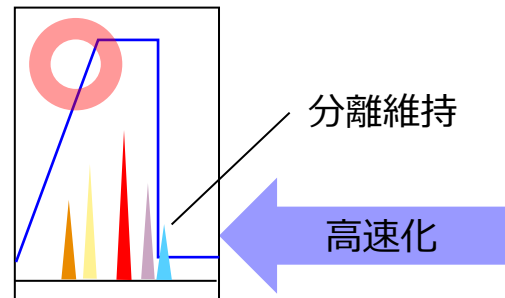


サンプル数の  
増加で処理が  
追いつかない

## UHPLCと微粒子カラムの採用



- 充填剤の低拡散性能で高い理論段数を実現
- 未分離ピークの分離達成



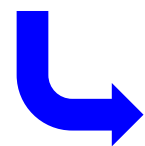
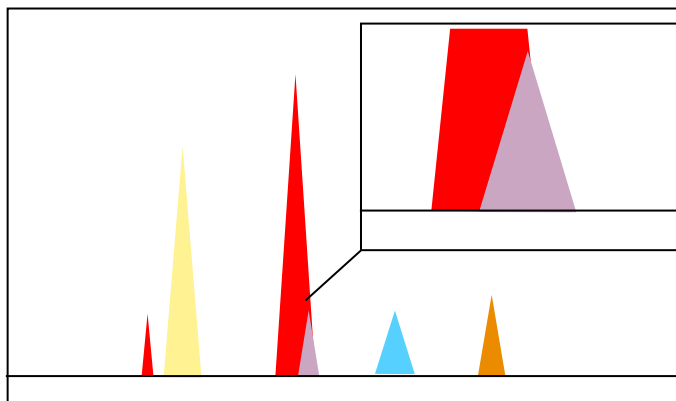
- 微粒子カラム特有の高速性
- 高分離を活かして分離維持

**UHPLCと微粒子カラムの採用により分析の効率化が可能**

# 既存UHPLCのよくある問題点

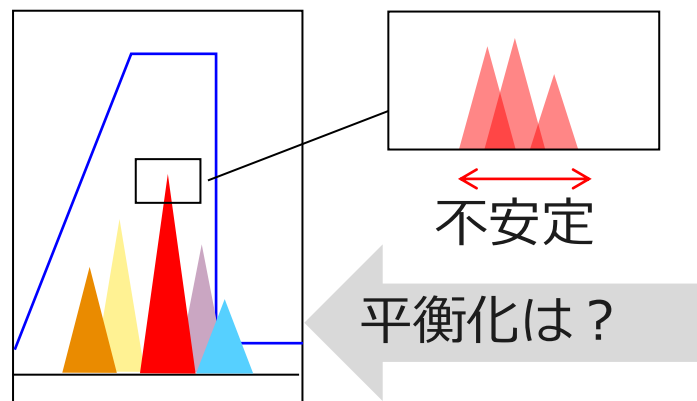
UHPLCを導入しても、期待通りの性能が出ないケースも・・・

## 微粒子カラムでも 分離改善が限定的



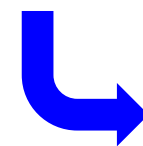
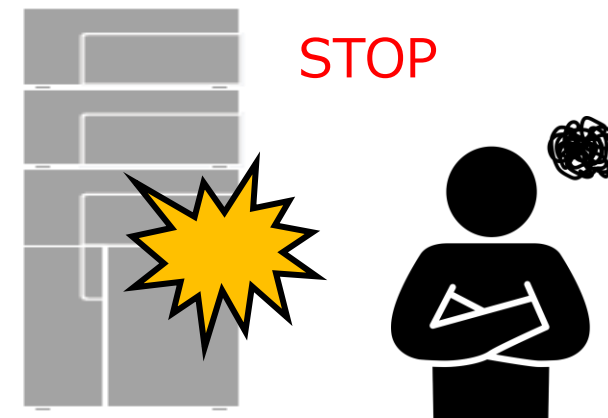
- ピーク幅が太い
- 分離が未達成

## 超高速分析で 分析安定性に課題



- 保持時間が不安定
- 平衡化が未達成

## 汎用HPLCと比較し 装置の堅牢性に難あり

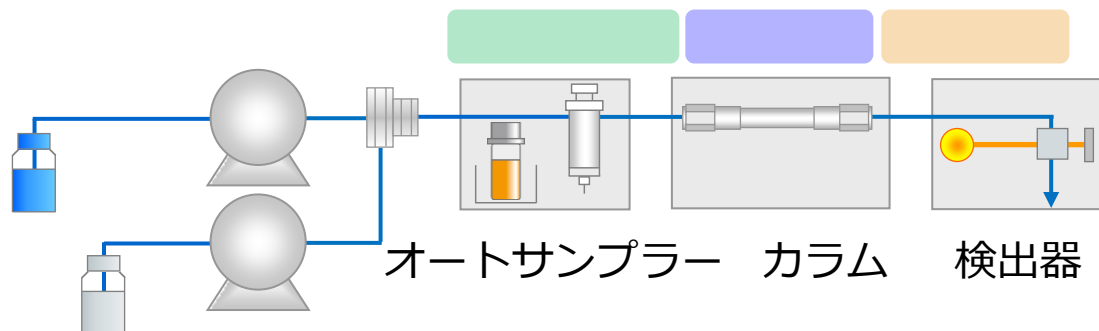
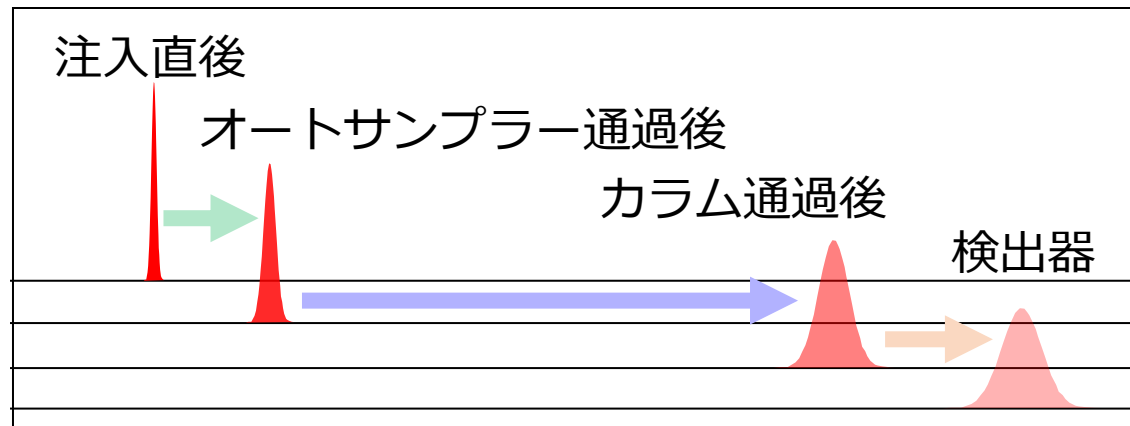


- 流路がよく詰まる
- 部品交換が高額

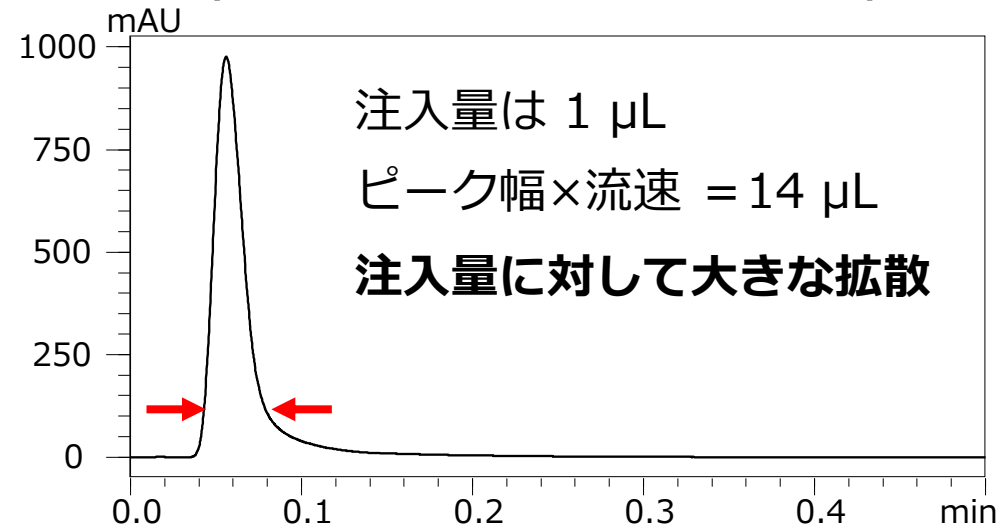
➡ 高性能なUHPLCのはずが、どうしてこのような課題が発生するのか？

# 課題① 微粒子カラムでも分離改善が限定的

## HPLCの内部でピークが広がる様子



## 装置由来の拡散の確認例 (カラム無しでピークを評価)

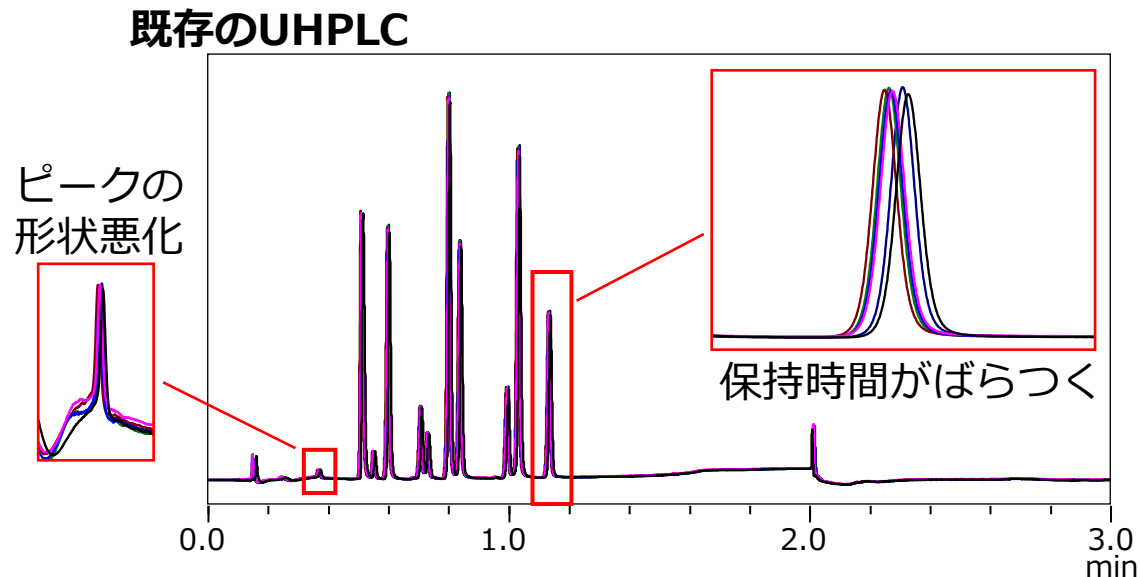


Column : None  
Mobile Phase : Water/Acetonitrile = 3:7  
Flow rate : 0.5 mL/min  
Inj. Vol. : 1  $\mu$ L  
Sample : 40 mg/L Caffeine in Water/Acetonitrile = 1:9  
Detection : 273 nm

➡ カラム内拡散が少ない微粒子カラムでは、装置由来の拡散の影響が顕著

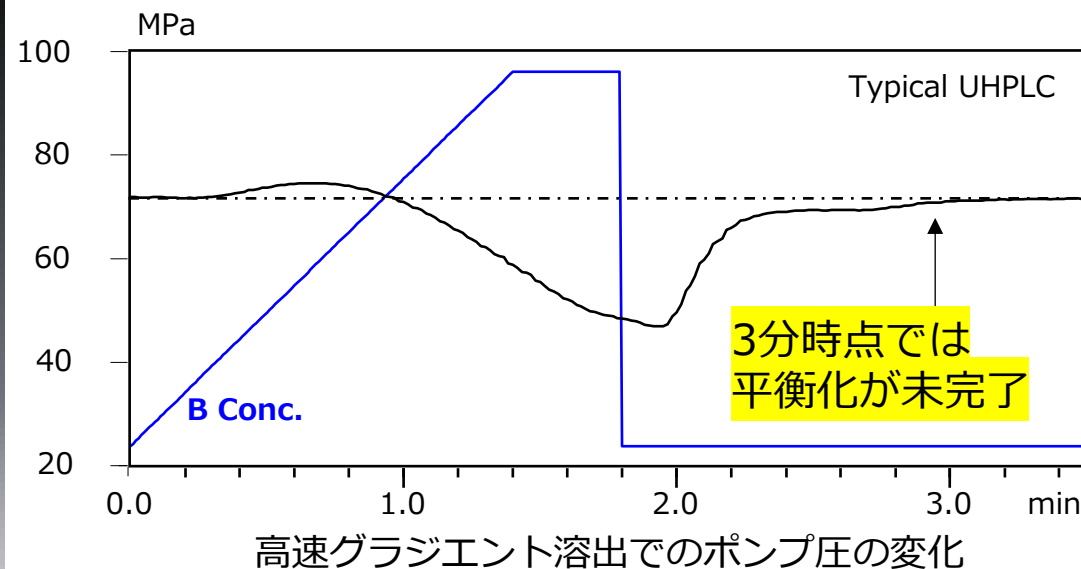
## 課題② 超高速分析で分析安定性に課題

### 送液ユニットの脈動・送液不良の影響



- ピークの保持時間がばらつきやすい
- グラジエント初期のピークの形状が崩れる  
→ 脈動低減にはミキサ容量増加が効果的だが...

### グラジエント応答への影響



### グラジエント応答に時間がかかる理由

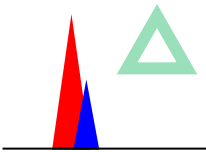
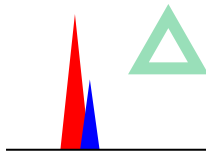
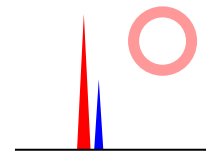
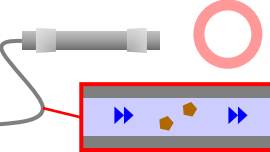
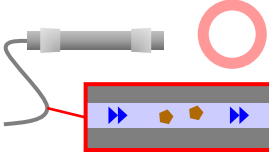
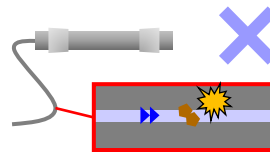
- 脈動低減のためシステム容量が大きい傾向
- 超高压条件における移動相の圧縮

➡ 高速分析では、グラジエント応答性と脈動低減による安定性向上が必要

# 課題③ UHPLCの堅牢性

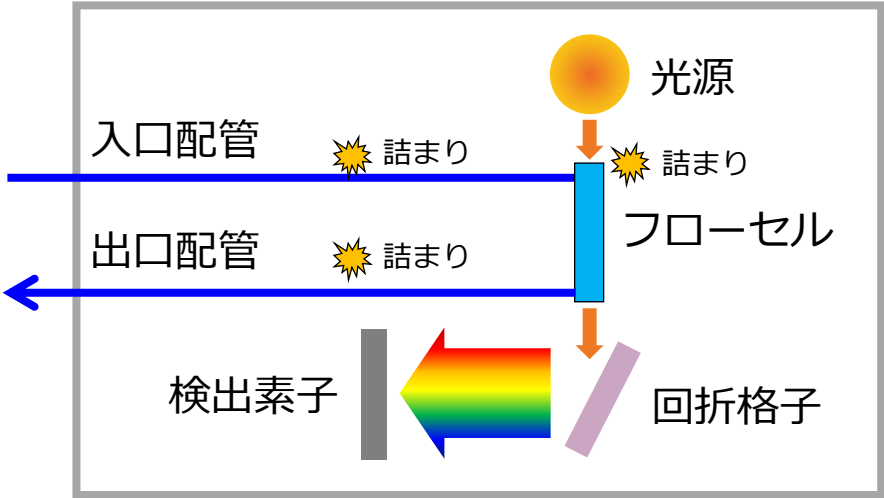
## UHPLCでは汎用HPLCに比べて堅牢性が低いと言われる理由

配管の低拡散性と詰まりリスクの関係

|            | HPLC                                                                               | UHPLC-like                                                                         | UHPLC                                                                               |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| 内径<br>(mm) | 0.3                                                                                | 0.1                                                                                | 0.06                                                                                |
| ピーク<br>拡散  |   |   |   |
| 堅牢性        |  |  |  |

低拡散に特化した検出器の弱点

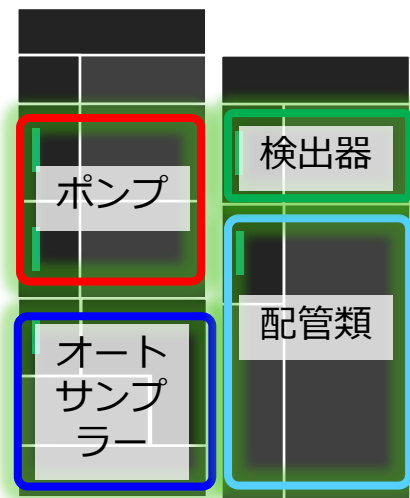
PDA検出器の内部構造



- 複雑構造のため部品交換不可
- 詰まりが発生しても修理不可

➡ 低拡散性能に特化した装置は、詰まりリスクと修理コストが高い

# 次世代UHPLCに求められる装置性能



従来UHPLC

## 送液ユニット

### 要求：グラジエント応答性の向上

- ・グラジエント応答性の向上
- ・脈動の低減と内部容量の削減

## 検出器（PDA）

### 要求：検出セル内での拡散を低減

- ・ピークが拡散しにくい光学セル
- ・高いメンテナンス性と堅牢性

## オートサンプラー

### 要求：ピークの拡散を低減

- ・試料バンドを維持した注入方式
- ・拡散の原因となる内部容量の削減

## 配管やフィッティング

### 要求：試料通過時の拡散を低減

- ・ピークが拡散しにくい配管設計
- ・配管の詰まりやすさを低減



**これらの要望を満たしたUHPLCの開発が求められる**

# EXPERIENCE NEW SEPARATION

# Nexera X4

ULTRA HIGH PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPH

Nexera™ X4は、島津製作所のNexeraシリーズで培われた技術を継承した、次世代超高速液体クロマトグラフ (UHPLC) システムです。業界最高レベル\*の低拡散設計により、シャープなピークとこれまでにない高い分離性能を実現します。また、最先端の流体制御技術により、超高压下での高速分析においても抜群の送液安定性を実現し、信頼性の高い分析結果を提供します。UHPLCのハイエンド機種であるNexera X4は、最高レベルのパフォーマンスを求めるすべてのラボに、新たな価値をもたらします。

\* カラム外拡散 (ECBB 値) 7  $\mu$ L

## Ultra-Sharp Peaks

ピーク拡散を低減し、優れたクロマトグラフィー分離を実現します

## Ultra-Fast Analysis

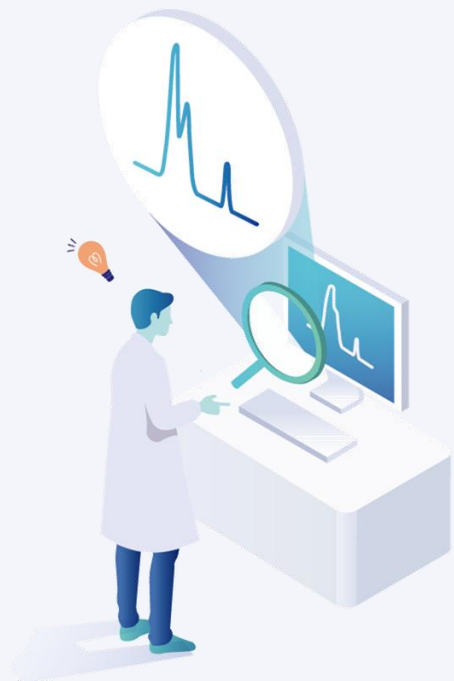
超高速グラジエントの安定性を高め、生産性を向上させます

## Ultra-Low Solvent Consumption

小内径カラムとの組み合わせにより、溶媒消費量を大幅に削減します



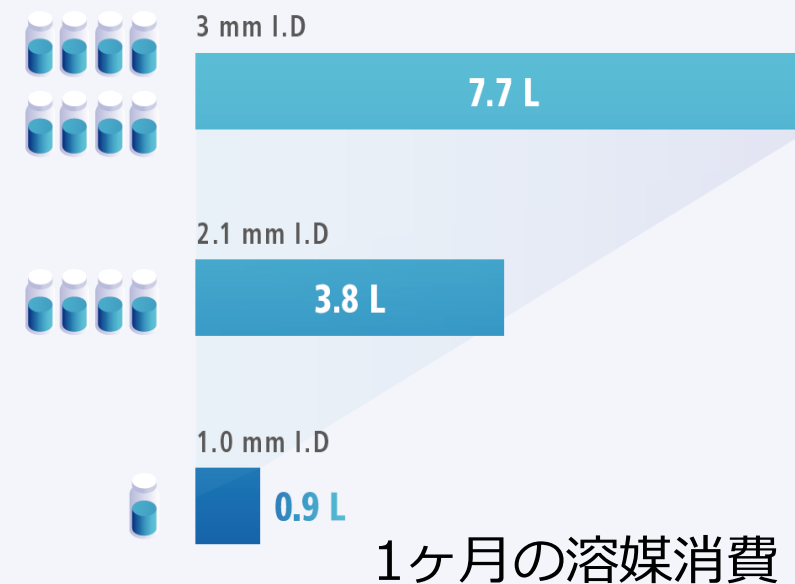
# Nexera X4の特長: Experience New Separation



**Ultra-sharp Peak**  
ピーク拡散を低減し、  
優れたピーク分離を実現



**Ultra-fast Analysis**  
超高速グラジエントを実現し、  
生産性を大幅に向上



**Ultra-low Sol. Consumption**  
小内径カラムとの組み合わせで  
溶媒消費量を大幅に削減

# 低拡散性能を実現するNexflowテクノロジーを搭載



## オートサンプラ：新設計の注入用バルブを採用

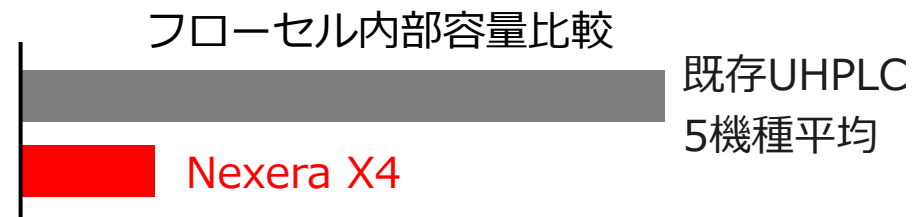
新型の注入用バルブ



- 新設計の注入用バルブで内部容量低減
- 拡散を低減する注入モードを搭載

## PDA検出器：フローセル改良で低拡散・高メンテナンス性を実現

新型フローセル



- キャピラリセル採用で内部容量を低減
- 内部の詰まりも部品交換で対応可能

# 低拡散性能を実現するNexflowテクノロジーを搭載

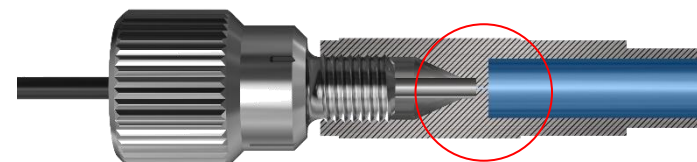
## フィッティング：手締めフィッティングNexlock IIを採用

Nexlock II



Nexlock II

カラム

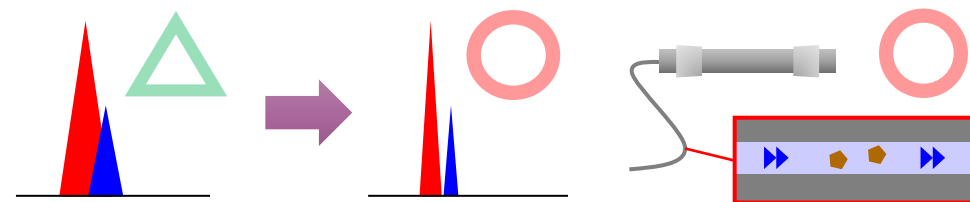


- 手締めで130MPaまで対応
- 端面接続でゼロデッドボリューム実現

## 特殊配管採用：内径を変えずに低拡散を実現する独自技術

ピーク拡散低減

詰まりに強い

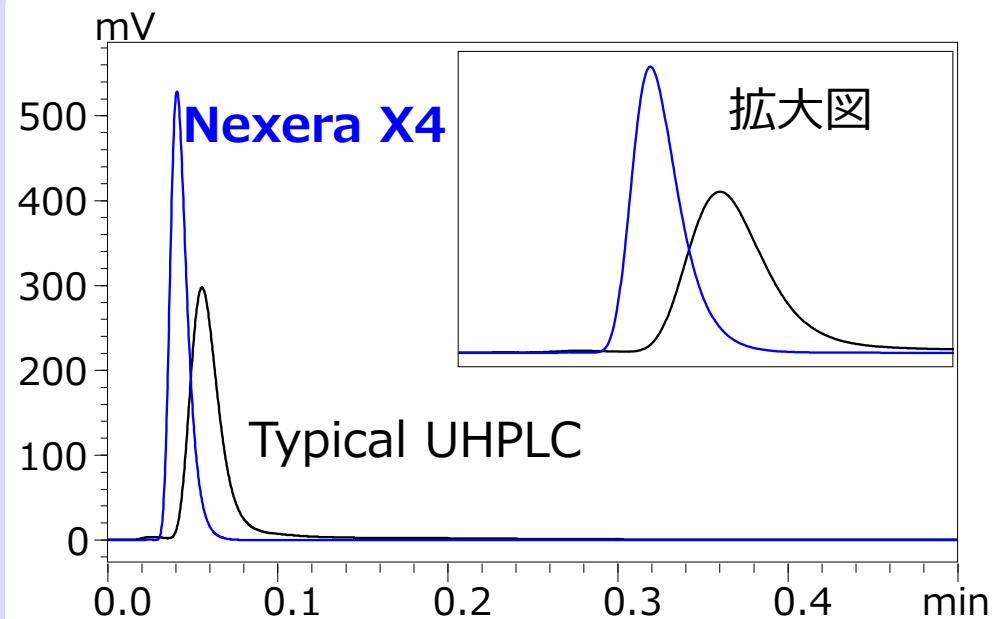


配管を独自加工

- 詰まりを抑制しつつピーク拡散も低減

# 低拡散技術 Nexflowテクノロジー によるデータの品質向上

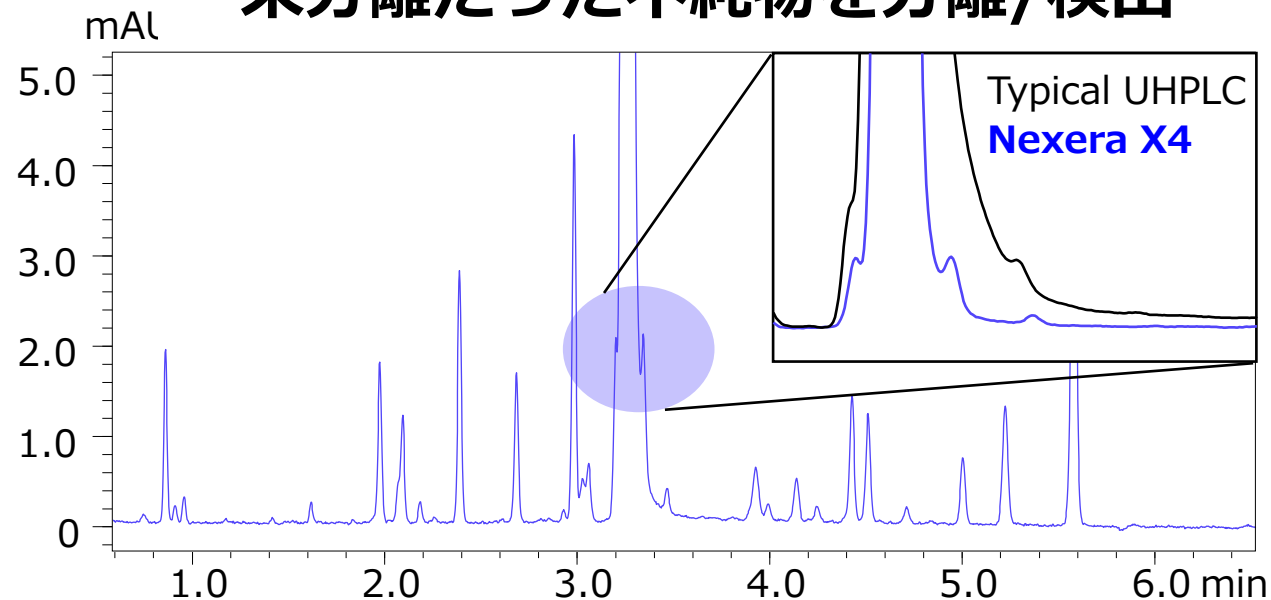
## 装置での拡散を低減



### 💡 ユーザーベネフィット

- シャープなピークで感度（高さ）向上
- 近接ピークにおける分離度の向上

## 未分離だった不純物を分離/検出



医薬品混合試料に含まれる不純物の分析結果

|                   |                                                                                            |
|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| Column            | : Shim-pack <sup>TM</sup> NovaCore C18-HB (50 mm x 2.1 mm I.D., 1.7 μm)                    |
| Mobile phase      | : A) 0.1% formic acid in water<br>B) 0.1% formic acid in Acetonitrile                      |
| Time program      | : B conc. 10% (0 min) → 40% (7.00 min)<br>→ 90% (7.01 – 8.00 min) → 10% (8.01 – 10.00 min) |
| Flow rate         | : 0.5 mL/min                                                                               |
| Column oven temp. | : 40°C                                                                                     |
| Inj. vol.         | : 2 μL                                                                                     |
| Detection         | : 254 nm                                                                                   |

**装置由来の拡散を低減し、優れたクロマトグラフィー分離を実現**

# 超高速分析性能を実現する送液ユニット

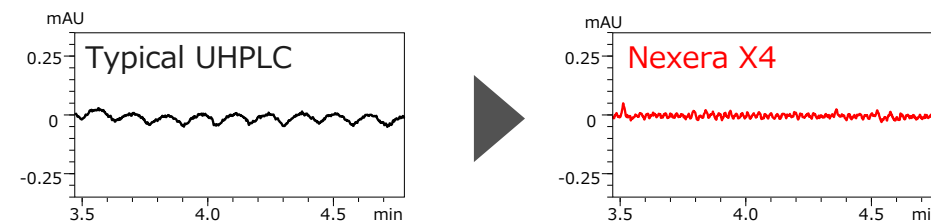


## 送液ユニット：独立4駆動プランジャが脈動を低減

送液ユニット内部



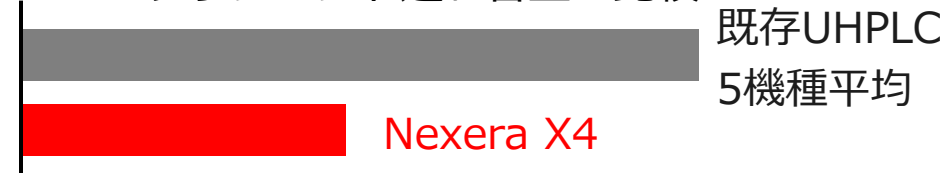
脈動低減に伴うベースライン安定化



- ・ 移動相の圧縮率をリアルタイムで測定
- ・ 圧力フィードバックにより脈動を低減

## システム全体：ポンプ性能向上に伴い流路全体を最適化

グラジエント遅れ容量の比較

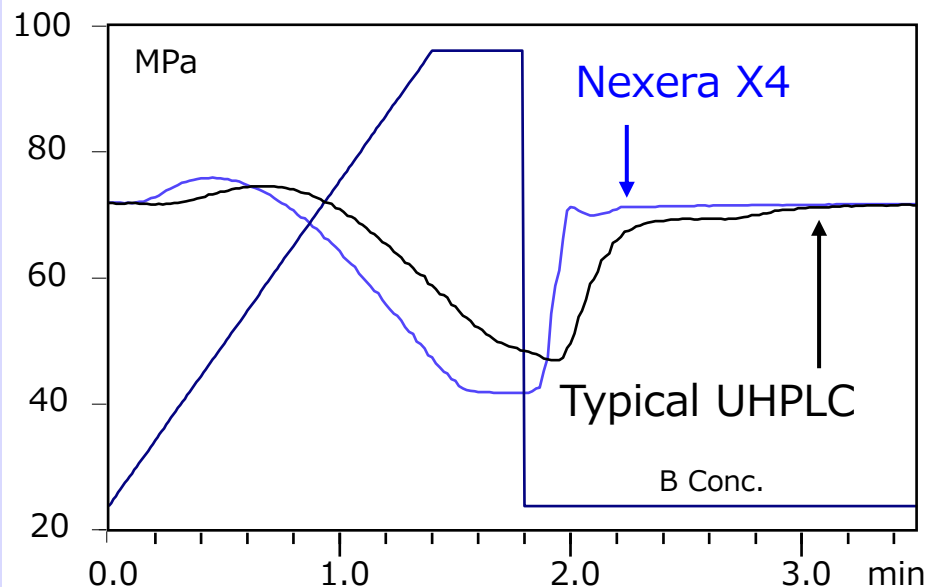


新設計 マイクロミキサ

- ・ 脈動低減に伴いミキサ容量削減に成功
- ・ システム容量削減で高速分析に適応

# 超高速分析性能によるグラジエント応答性向上と実分析例

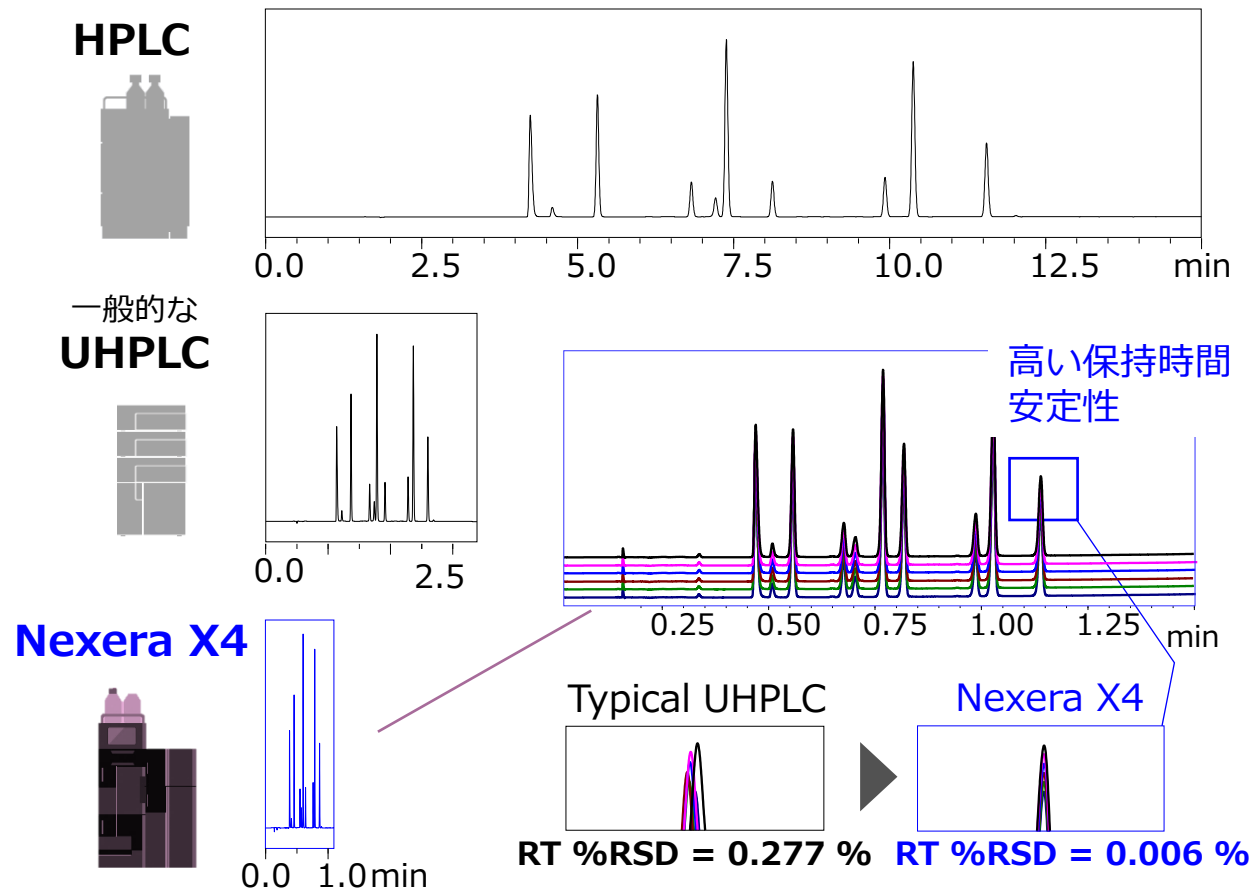
## グラジエント応答性比較



### 💡 ユーザーベネフィット

- 素早い平衡化で分析サイクルを短縮
- 超高速分析でも保持時間を安定化

## 分析の高速化事例



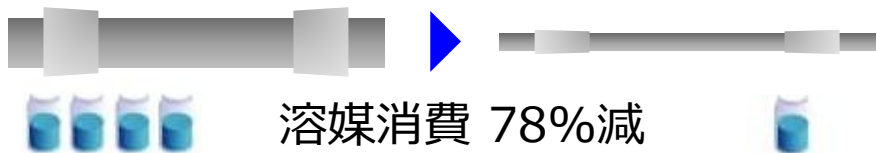
**高いグラジエント応答性で、既存のUHPLCを凌駕する高速分析を実現**

# 小内径カラムを活用した省溶媒分析

## 小内径カラムへの適応

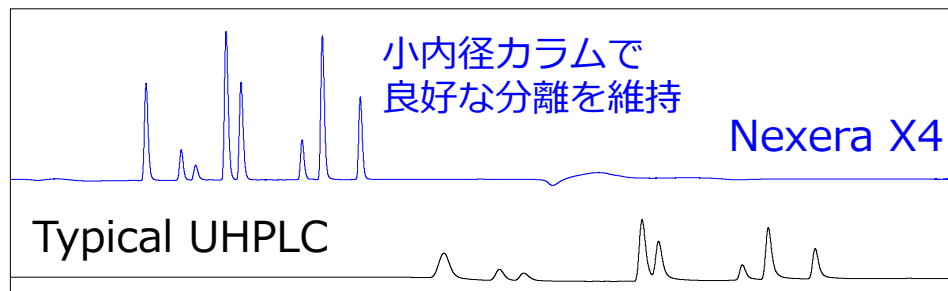
内径 2.1 mm

内径 1.0 mm



溶媒消費 78%減

小内径カラムの課題→拡散の影響が大きい

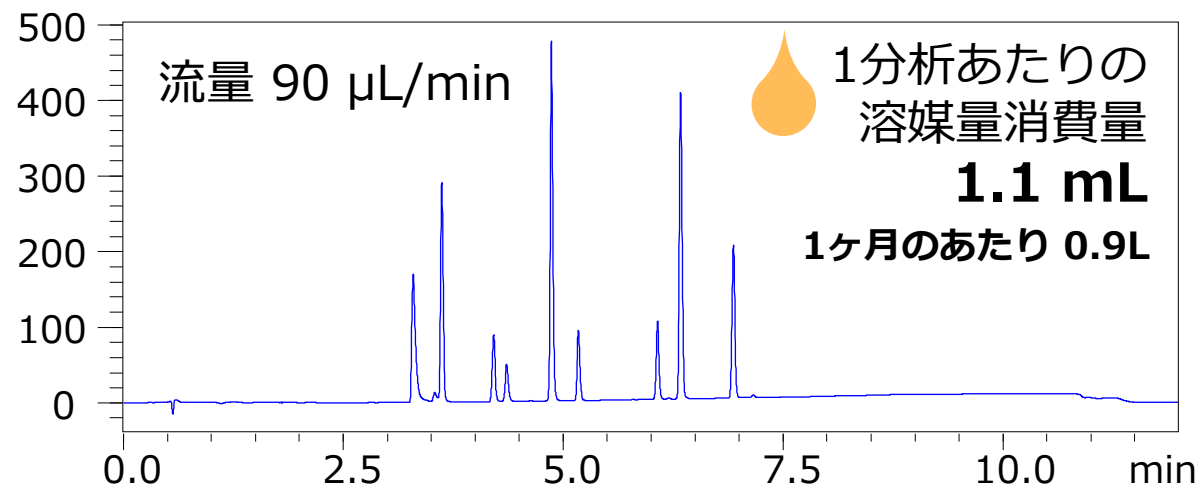


Nexera X4

## 💡 ユーザーベネフィット

- 省溶媒でコストと環境負荷低減
- 溶媒交換の手間を削減し、業務効率UP

## 環境負荷を低減した省溶媒分析



1.0 mm内径のカラムを用いた医薬品混合試料の分析結果

|                   |                                                                                 |
|-------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| Column            | : Shim-pack NovaCore C18-HB (50 mm x 1.0 mm I.D., 1.7 μm)                       |
| Mobile phase      | : A) 0.1% formic acid in water<br>B) 0.1% formic acid in Acetonitrile           |
| Time program      | : B conc. 5% (0.00-1.00 min) → 80% (8.00-10.00 min)<br>→ 5% (10.01 - 12.00 min) |
| Flow rate         | : 90 μL/min                                                                     |
| Column oven temp. | : 40°C                                                                          |
| Inj. vol.         | : 0.5 μL                                                                        |
| Detection         | : 254 nm                                                                        |

**システム拡散の影響を受けやすい小内径カラムでも、納得の性能を実現**

# 質量分析計の性能を最大化する Nexflow tubing for MS



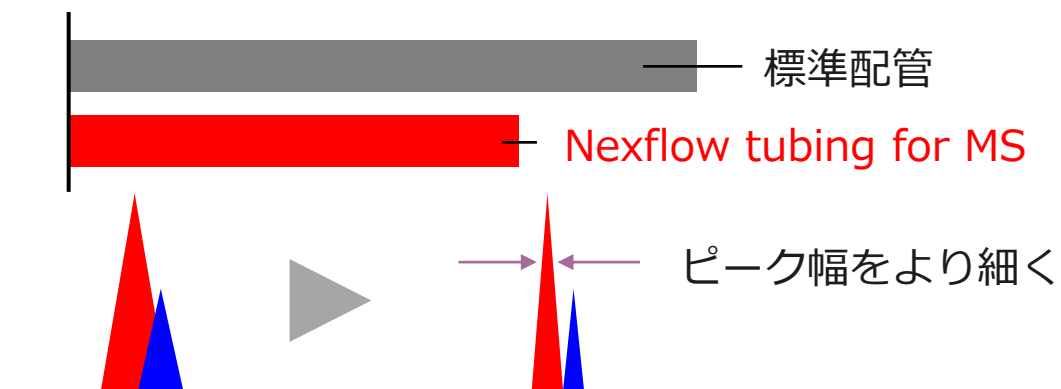
専用配管キット: Nexflow tubing for MS



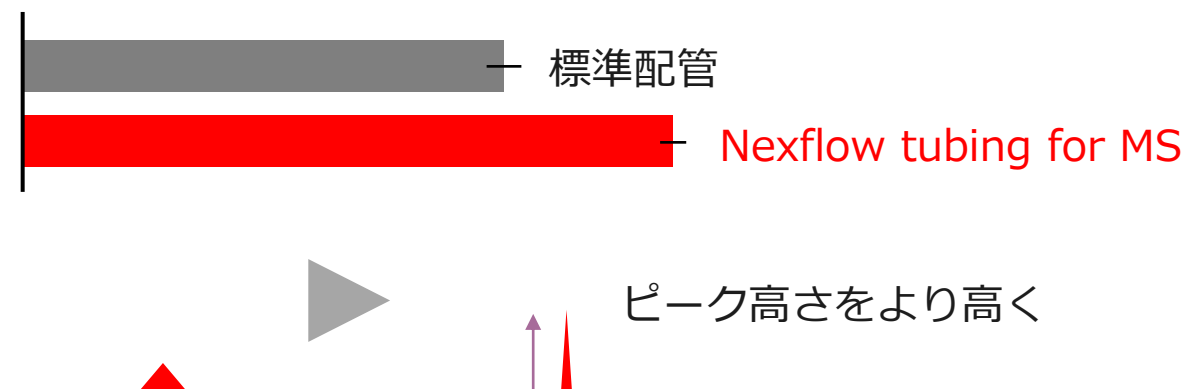
- ・ 配管内の拡散を低減
- ・ 配管端面の研磨処理でデッドボリューム低減

**Nexflow tubing for MS : ピーク拡散を低減し、高感度・高分離を実現**

ピークの幅（分離に関係）の比較

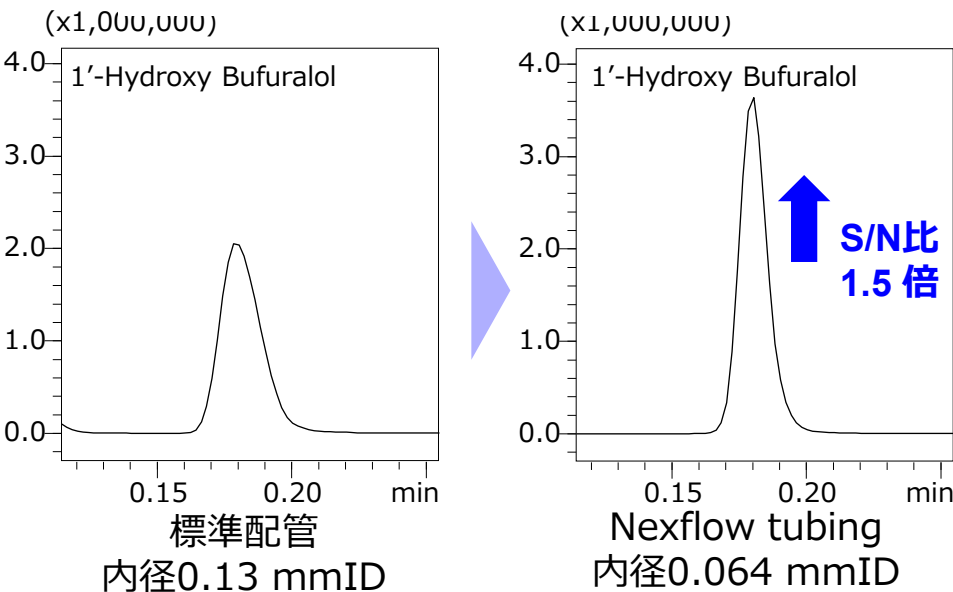


ピークの高さ（感度に関係）の比較



# Nexera X4とLC-MSを組み合わせたアプリケーション紹介①

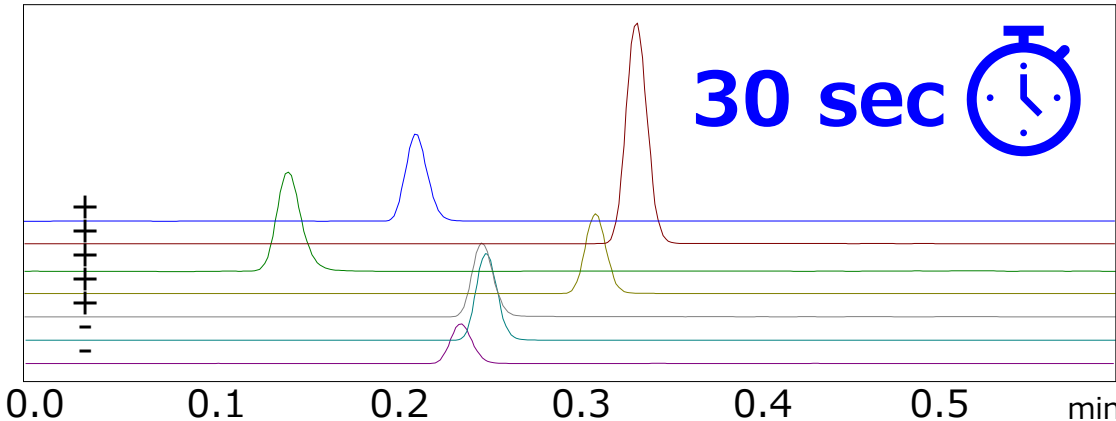
## Nexflow tubing for MS で ピーク拡散を低減



### 💡 ユーザーベネフィット

- 超高速分析でスループットを向上
- ピーク拡散低減で、分離と感度を向上

## 超高速グラジエントによる ハイスループットLC-MS分析



| Compound             | Polarity | Retention time   |      | Area       |      |
|----------------------|----------|------------------|------|------------|------|
|                      |          | Mean value (min) | %RSD | Mean value | %RSD |
| 1'-Hydroxy Bufuralol | +        | 0.214            | 0.14 | 2485474    | 2.37 |
| Oxidized Nifedipine  | +        | 0.337            | 0.11 | 6510872    | 2.82 |
| Acetaminophen        | +        | 0.146            | 0.10 | 708714     | 2.87 |
| 4'-hydroxydiclofenac | +        | 0.315            | 0.11 | 399563     | 4.22 |
| 1-hydroxymidazolam   | +        | 0.251            | 0.20 | 2066492    | 3.15 |
| Hydroxy Tolbutamide  | -        | 0.254            | 0.20 | 445907     | 4.14 |
| 7-Hydroxycoumarin    | -        | 0.240            | 0.10 | 64490      | 4.90 |

Nexera X4の高速GE・低拡散性能で、質量分析計の性能を最大化

# Nexera X4とLC-MSを組み合わせたアプリケーション紹介②



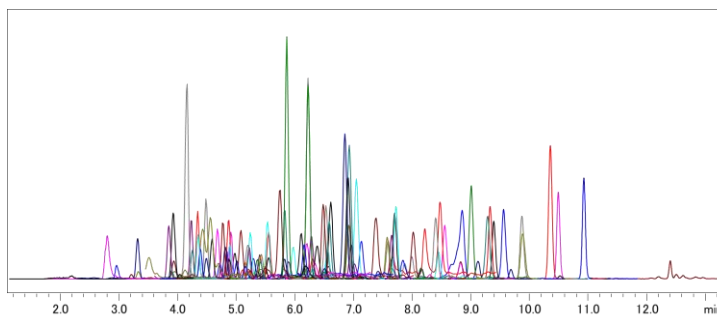
## 分析条件

|             |                                                   |
|-------------|---------------------------------------------------|
| System      | Nexera X4                                         |
| MPA         | 0.002% formic acid in 2 mM ammonium formate water |
| MPB         | 0.002% formic acid in 2 mM ammonium formate MeOH  |
| Column      | Shim-pack Scepter™ C18-120 (1.0 x 50 mm, 1.9 μm)  |
| Flow rate   | 75 μL/min                                         |
| Oven temp.  | 40°C                                              |
| Inj. volume | 0.5 μL                                            |

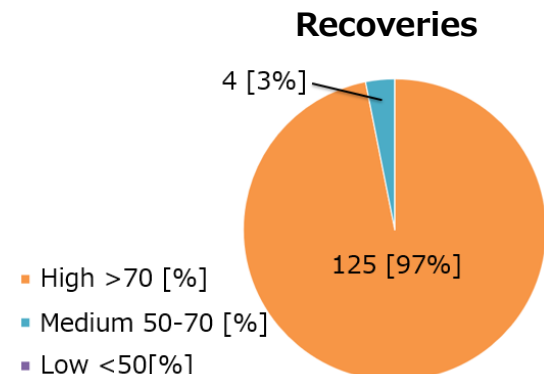
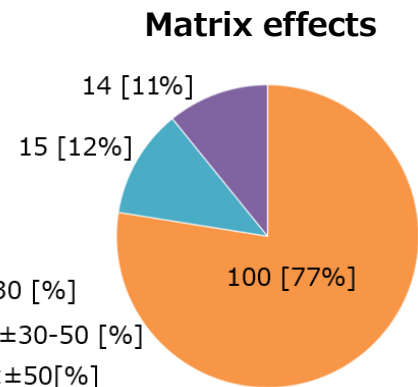
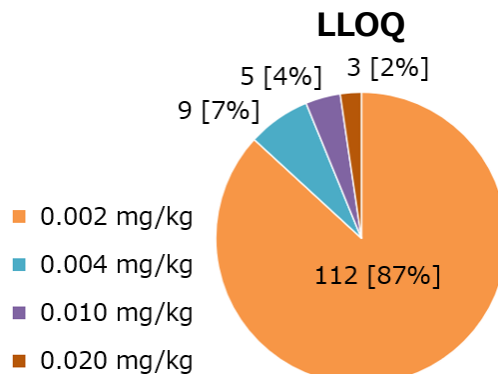
|                |                   |
|----------------|-------------------|
| System         | LCMS™-8065XE (TQ) |
| Ionization     | Heated ESI        |
| Int Temp.      | 100°C             |
| DL Temp.       | 200°C             |
| HB Temp.       | 200°C             |
| Nebulizing Gas | 0.8 L/min         |
| Heating Gas    | 5 L/min           |
| Drying Gas     | OFF               |

## 129種 農薬の高感度分析

最大3倍程度の感度向上が確認された



ほうれん草抽出液にスパイクした129種農薬  
のマスクロマトグラム(1.0 ng/mL)



# まとめ



## 既存UHPLCの課題

- 装置由来の拡散でピーク形状と分離が悪化
- 送液ユニットの性能で再現性悪化や分析時間が間延び
- 低拡散に特化すると装置堅牢性が悪化する傾向



## Nexera X4の特長

- Nexflowテクノロジー搭載で装置由来のピーク拡散を低減
- 新型送液ユニットで超高速グラジエント分析にも対応
- 省溶媒分析やMSフロント活用など、様々な分析に適応可能

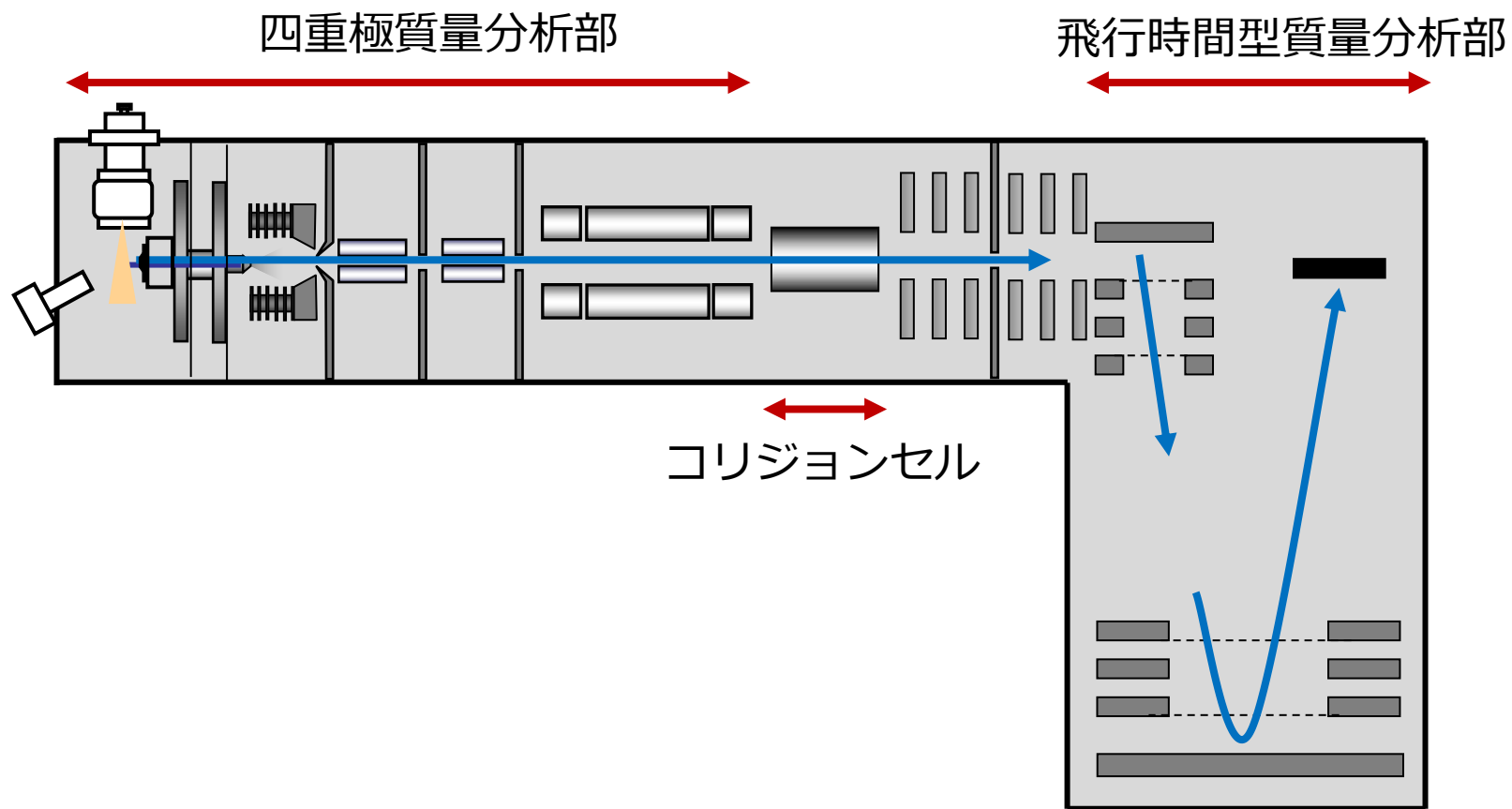
# 目次

---

1. Nexera™ X4 “次世代UHPLCの設計思想と製品特長”
2. ノンターゲット解析ソフトウェア  
LabSolutions Insight™ Profilerのご紹介

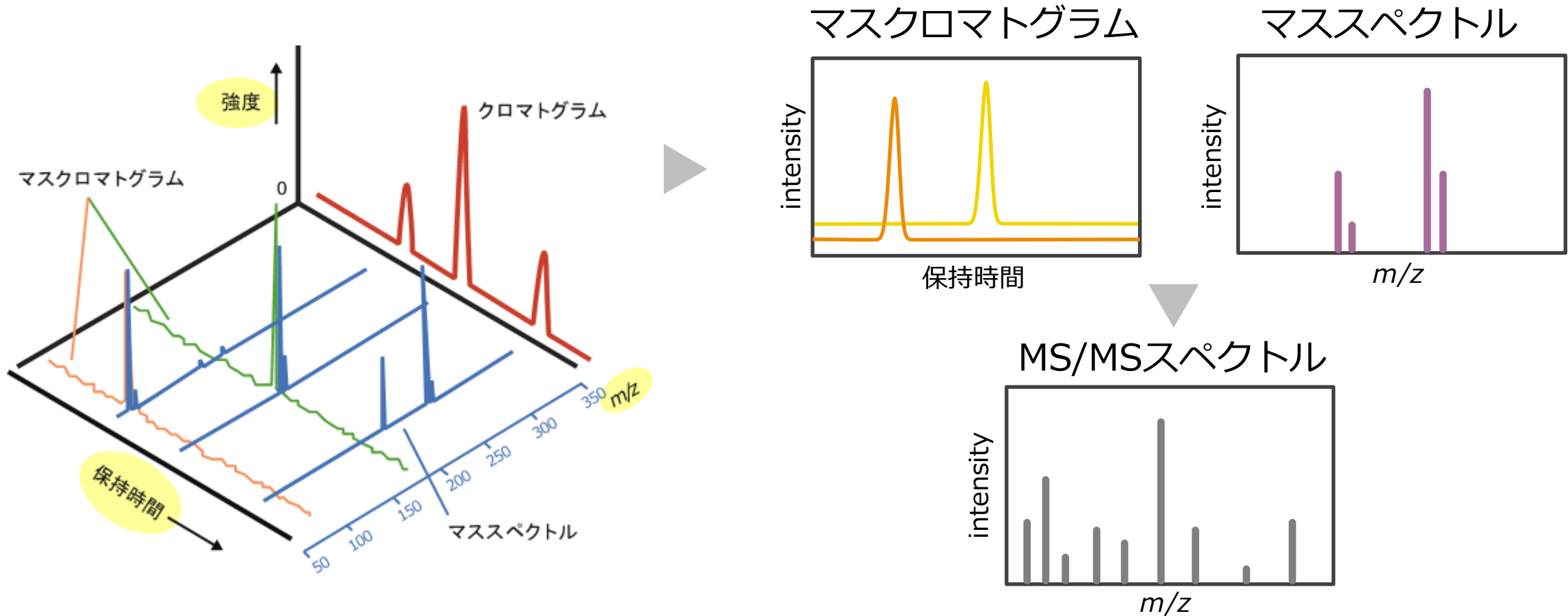
# 四重極飛行時間型質量分析計 (Quadrupole time-of-flight (QTOF) mass spectrometer)

LCMS-9030/LCMS-9050



QTOFMSは、高い質量精度と分解能を備えた質量分析計です。  
未知化合物の定性解析に使用され、ノンターゲット解析の基盤となります。

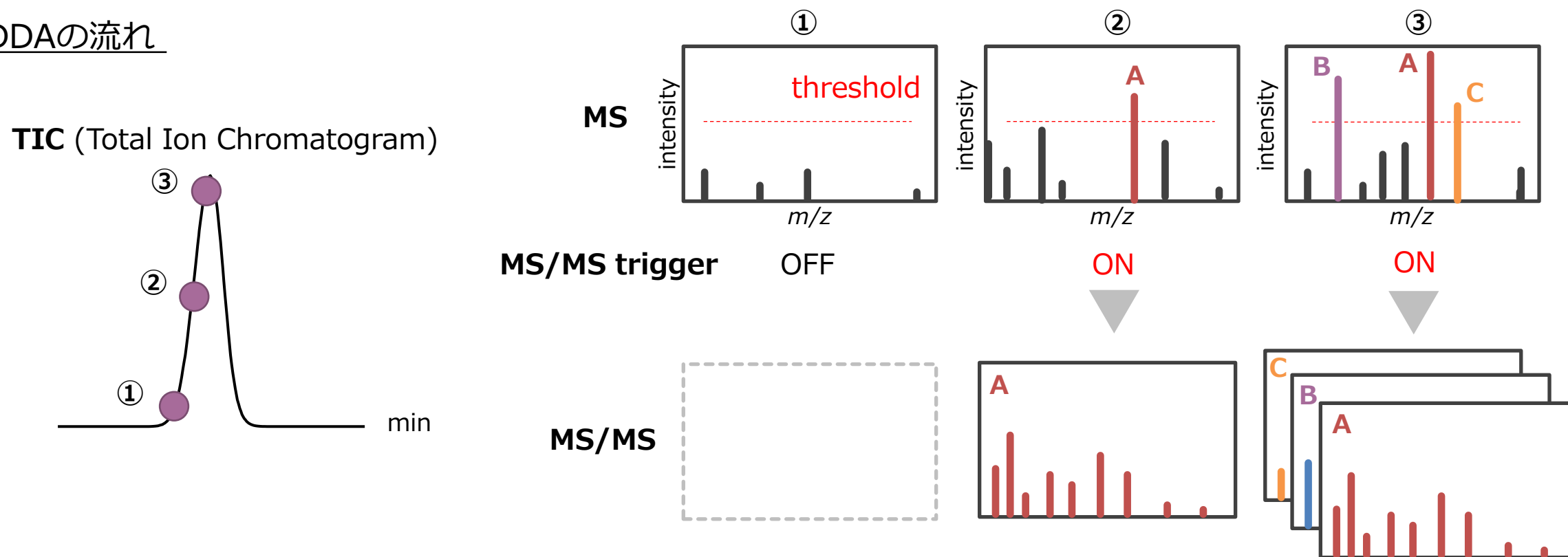
# LC-QTOFMSで得られるデータについて



- 保持時間、 $m/z$ および強度からなる3次元情報が得られます。
- 測定条件によっては、MS/MSスペクトルも取得されます。

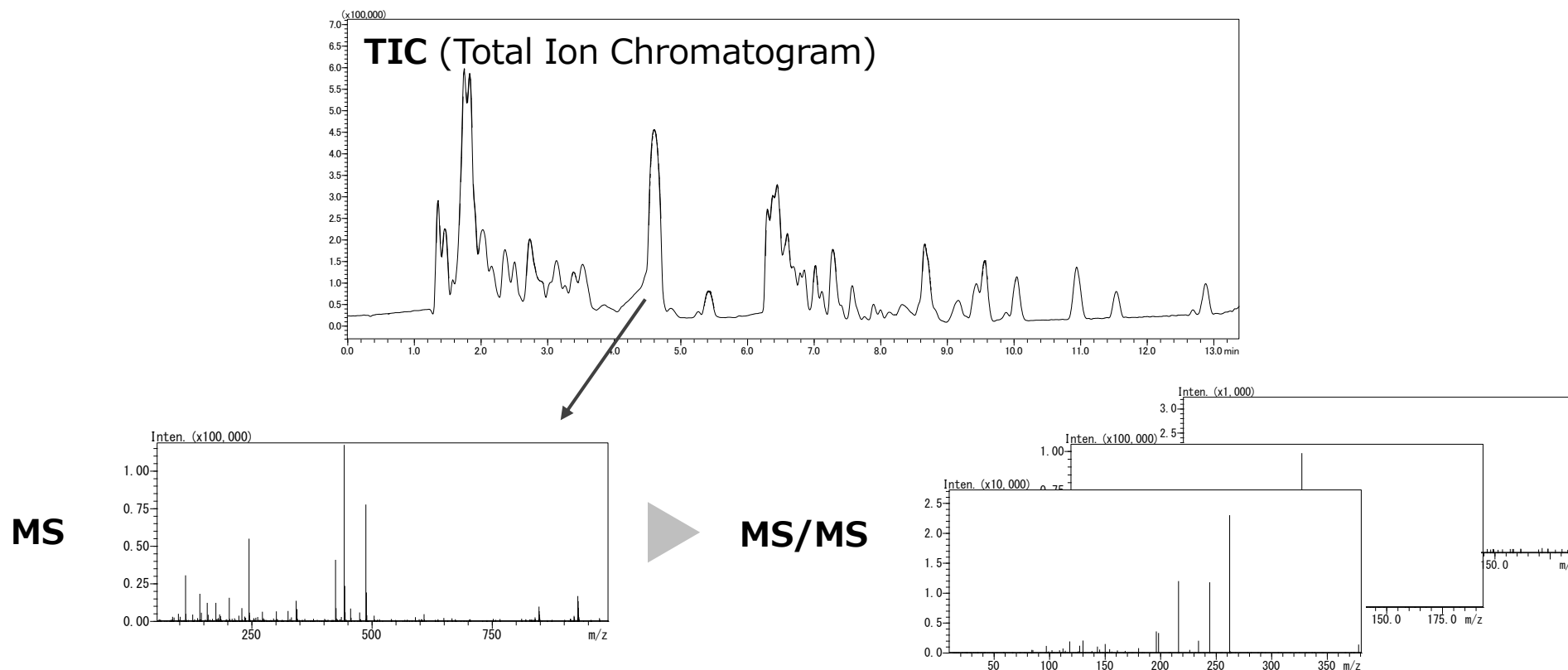
# DDA (data dependent acquisition)について

## DDAの流れ



DDAはしきい値以上の強度を持つピークのMS/MSを網羅的に取得する手法です。  
代謝物やタンパク質などの網羅解析に使用されます。

# DDAで得られるデータの解析について



ノンターゲット解析では、DDAデータに含まれる保持時間・強度・MSスペクトル・MS/MSスペクトルなど、複数の情報を同時に扱う必要があります。

**LabSolutions Insight Profiler** がノンターゲット解析を支援します！

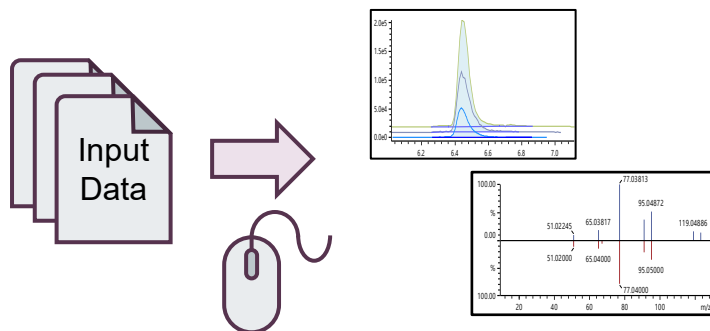
# LabSolutions Insight Profilerの特長

LC-QTOFMS用ノンターゲット解析ソフトウェア



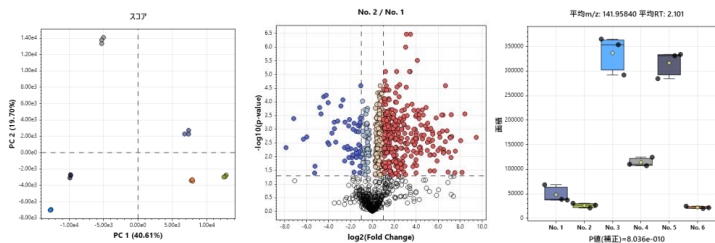
LabSolutions  
Insight Profiler

ノンターゲット解析をより簡単に



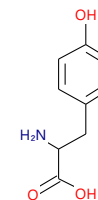
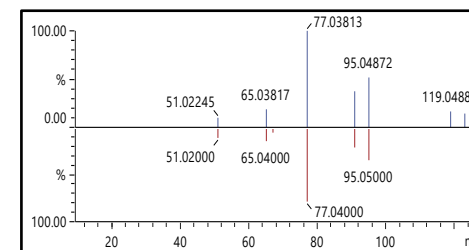
- ・直感的なユーザーインターフェイス
- ・一連のデータ処理を自動で実行

様々な可視化に対応



- ・主成分分析 (PCA)
- ・Volcano plot
- ・箱ひげ図

定性解析を支援する多彩な機能を搭載



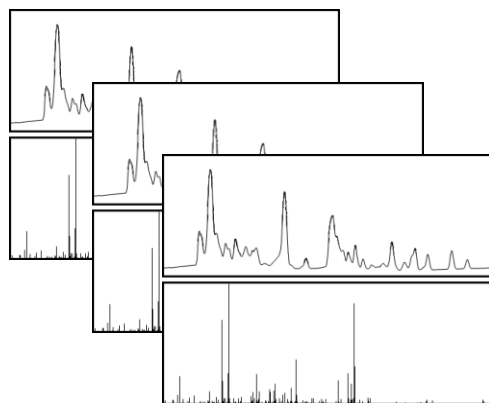
- ・ライブラリ検索
- ・リストスクリーニング
- ・組成推定
- ・オンラインデータベース検索

# LabSolutions Insight Profilerの解析の流れ

LCMS-9030/LCMS-9050



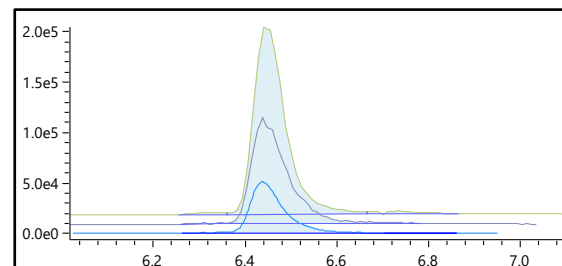
LabSolutions  
Insight Profiler



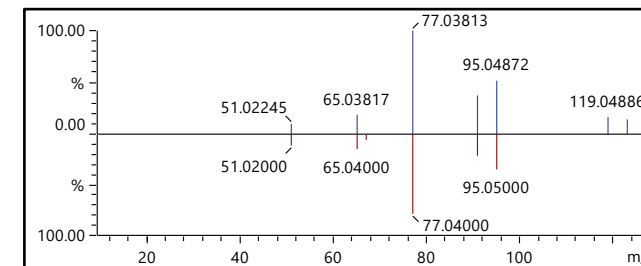
全行程を自動で実行

MS1データまたは DDAデータ

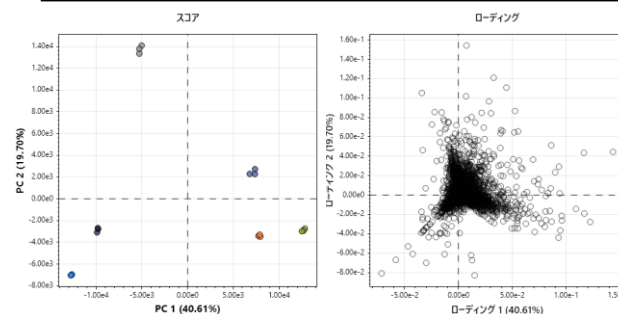
ピーク検出・アライメント



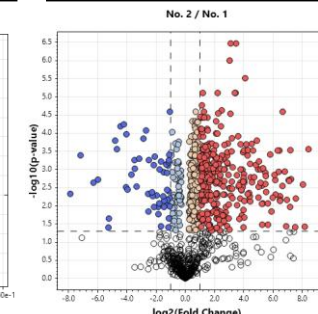
ライブラリ検索



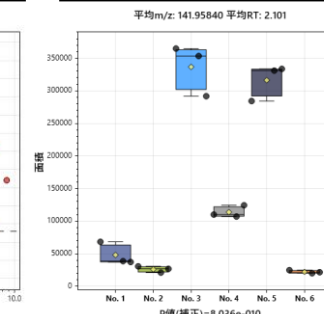
主成分分析 (PCA)



Volcano Plot

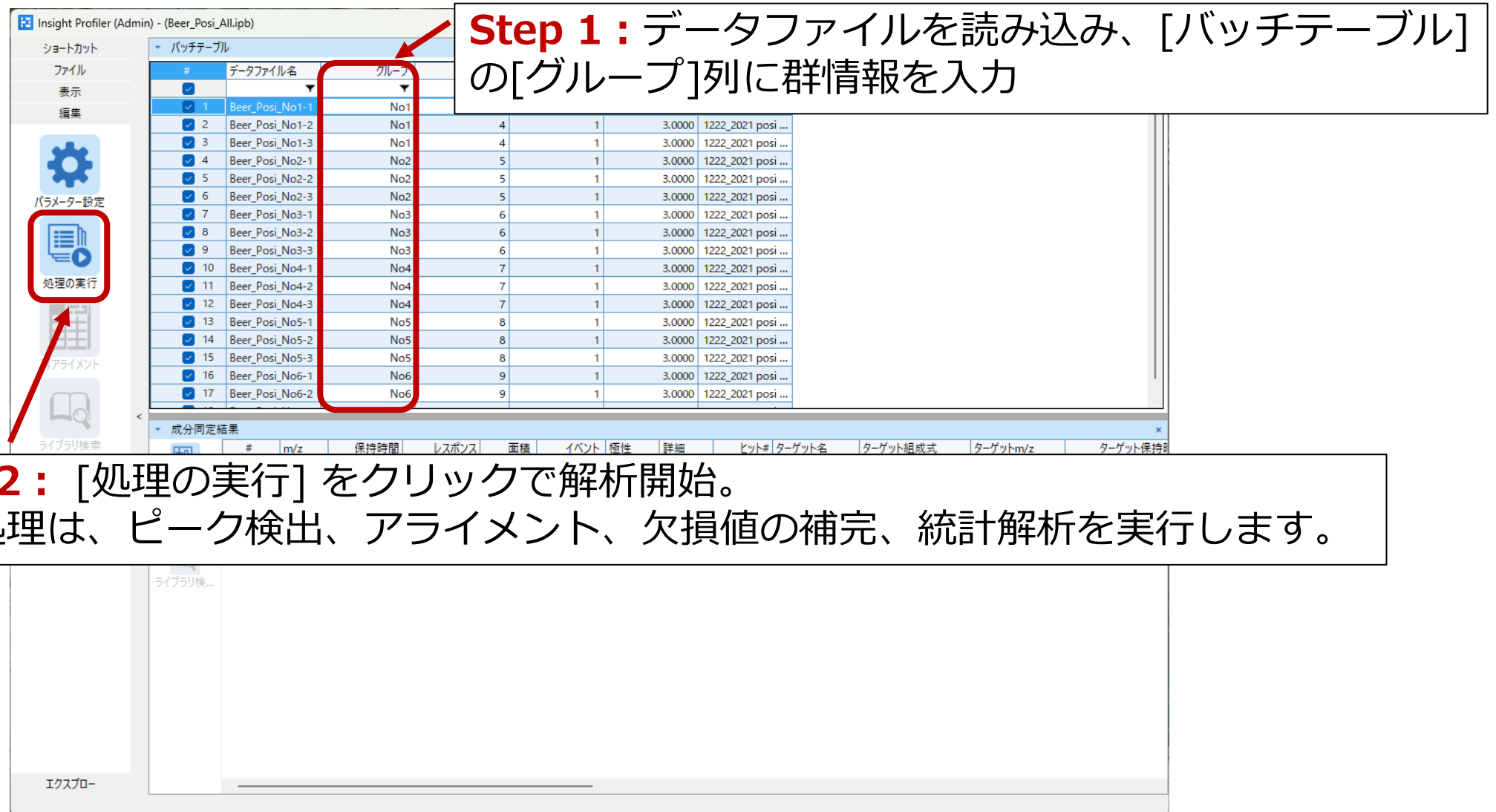


箱ひげ図



# Insight Profiler | たった “2 step”の簡単なワークフロー

**Step 1 :** データファイルを読み込み、[バッチテーブル]の[グループ]列に群情報を入力

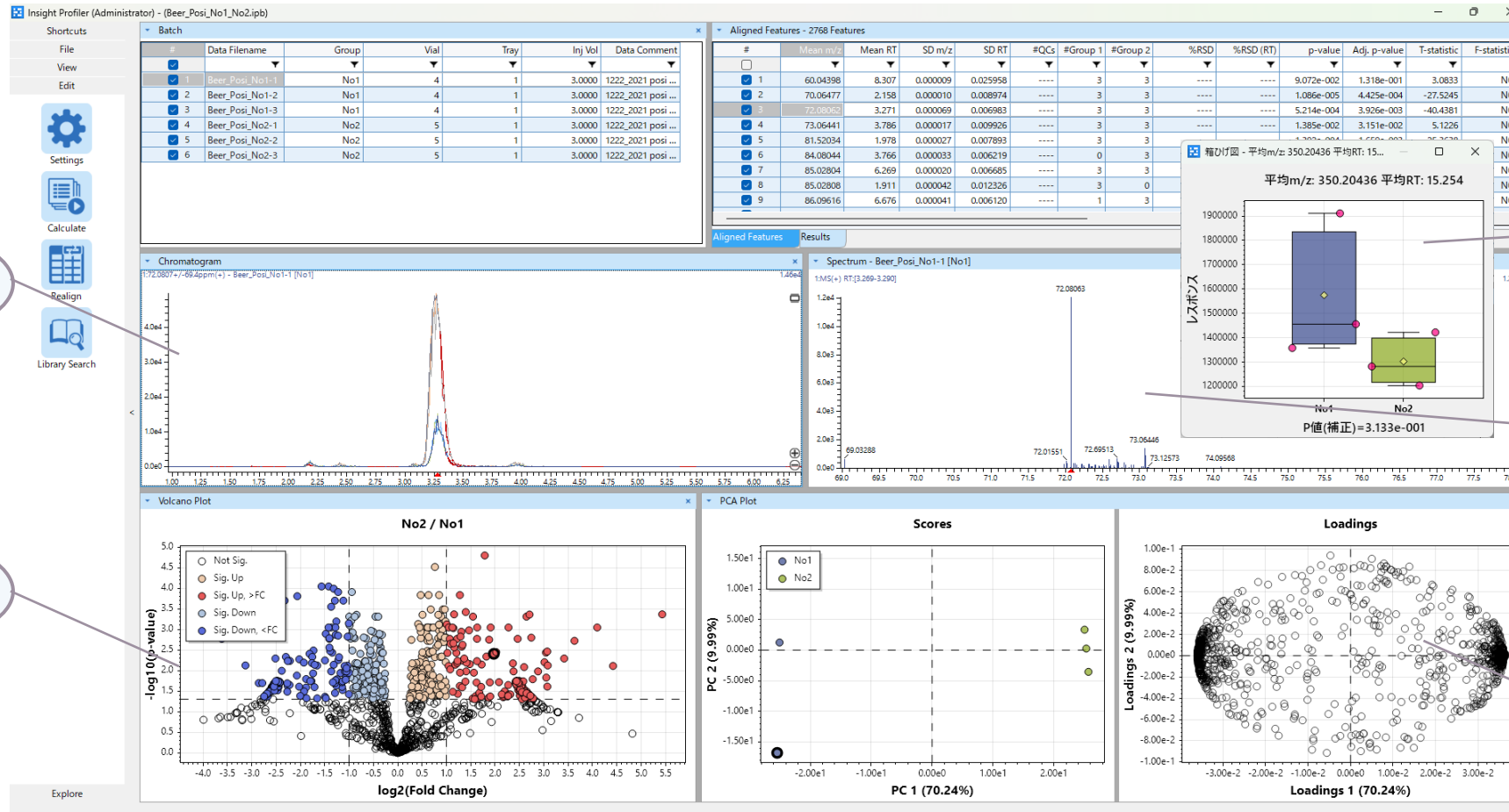


The screenshot shows the 'Insight Profiler (Admin) - (Beer\_Pos\_i\_Allipb)' window. On the left sidebar, the 'Execute Processing' button (represented by a document with a play icon) is highlighted with a red box and a red arrow. The main window displays a 'Batch Table' with columns for '#', 'Data File Name', 'Group', and several numerical columns. The 'Group' column contains values like 'No1', 'No2', 'No3', 'No4', 'No5', and 'No6'. A red box highlights the 'Group' column, and a red arrow points to it from the Step 1 text. Below the table, there is a section for 'Component Identification Results' with various sub-headers like '#', 'm/z', 'Retention Time', etc.

| #  | データファイル名         | グループ |   |   |        |                    |  |
|----|------------------|------|---|---|--------|--------------------|--|
| 1  | Beer_Pos_i_No1-1 | No1  |   |   |        |                    |  |
| 2  | Beer_Pos_i_No1-2 | No1  | 4 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 3  | Beer_Pos_i_No1-3 | No1  | 4 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 4  | Beer_Pos_i_No2-1 | No2  | 5 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 5  | Beer_Pos_i_No2-2 | No2  | 5 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 6  | Beer_Pos_i_No2-3 | No2  | 5 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 7  | Beer_Pos_i_No3-1 | No3  | 6 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 8  | Beer_Pos_i_No3-2 | No3  | 6 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 9  | Beer_Pos_i_No3-3 | No3  | 6 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 10 | Beer_Pos_i_No4-1 | No4  | 7 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 11 | Beer_Pos_i_No4-2 | No4  | 7 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 12 | Beer_Pos_i_No4-3 | No4  | 7 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 13 | Beer_Pos_i_No5-1 | No5  | 8 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 14 | Beer_Pos_i_No5-2 | No5  | 8 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 15 | Beer_Pos_i_No5-3 | No5  | 8 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 16 | Beer_Pos_i_No6-1 | No6  | 9 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |
| 17 | Beer_Pos_i_No6-2 | No6  | 9 | 1 | 3.0000 | 1222_2021 posi ... |  |

**Step 2 :** [処理の実行] をクリックで解析開始。  
解析処理は、ピーク検出、アライメント、欠損値の補完、統計解析を実行します。

# LabSolutions Insight Profiler



アライメント済の  
クロマトグラム

箱ひげ図

MSスペクトル

Volcano  
plot

PCA Plot

各画面の配置を自由に変更可能。PCディスプレイ複数画面に拡張表示が可能。

# アプリケーション：アルコール飲料の分析

アルコール飲料6種類の分析を実施しました。

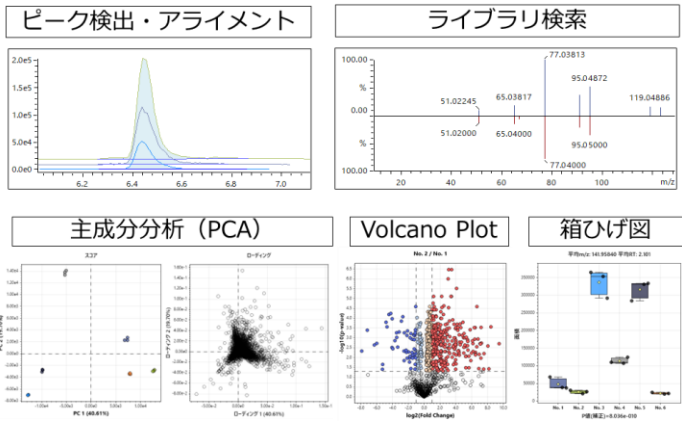
| No | サンプル         | 備考            |
|----|--------------|---------------|
| 1  | ビール 1        | ラガービール（下面発酵）  |
| 2  | ビール 2        | エールビール（上面発酵）  |
| 3  | 発泡酒          | プリン体ゼロ        |
| 4  | 新ジャンル        | 大豆たんぱくを原材料に使用 |
| 5  | ノンアルコールビール 1 | 国内製           |
| 6  | ノンアルコールビール 2 | 海外製           |



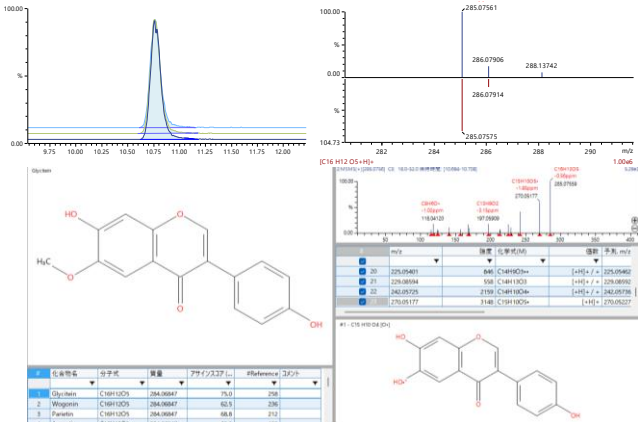
## LCMS-9030



## ライブラリ検索～統計解析



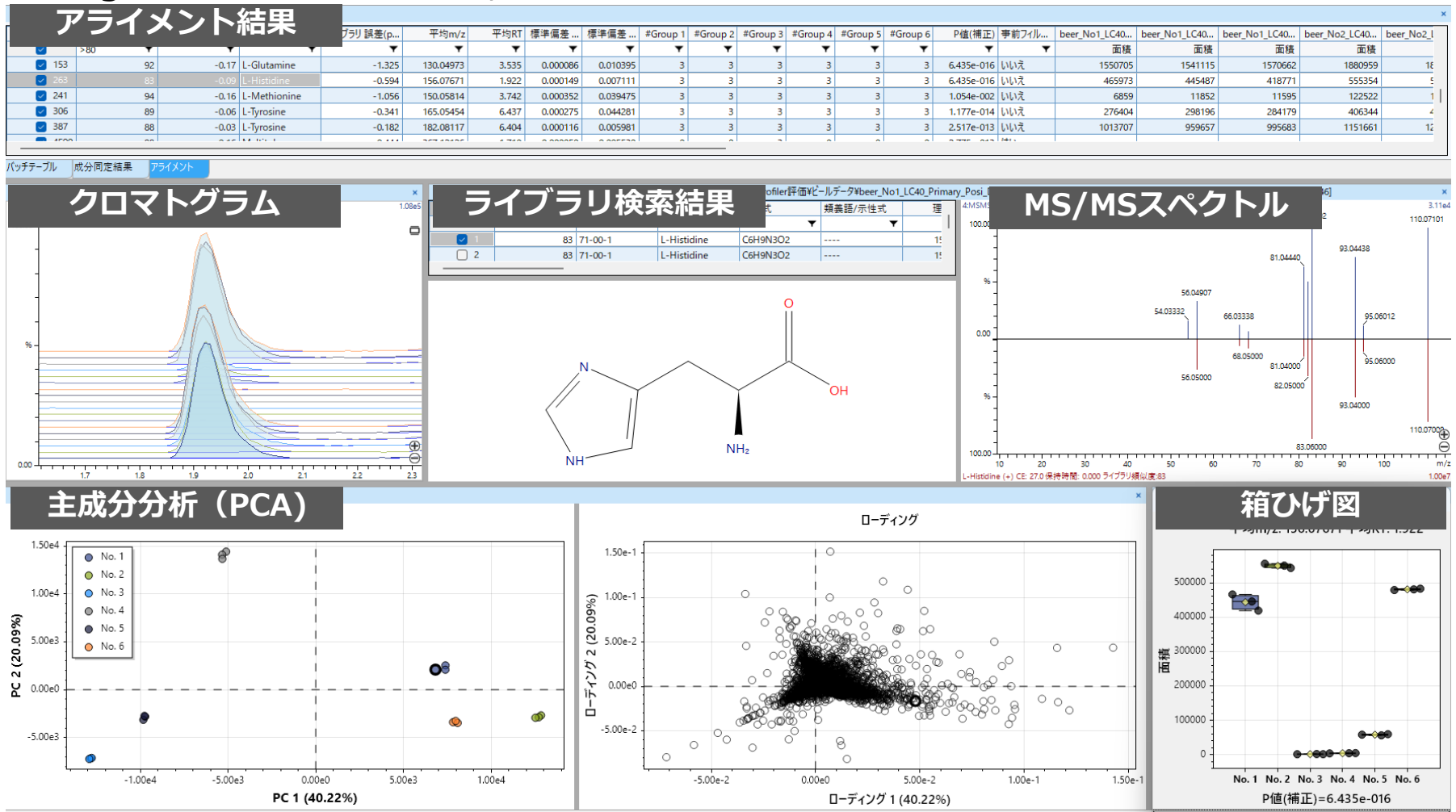
## 組成推定～オンラインデータベース検索



→ サンプルを三回ずつ測定し、LabSolutions Insight Profilerで解析しました。

# アプリケーション：アルコール飲料の分析 –解析画面の例–

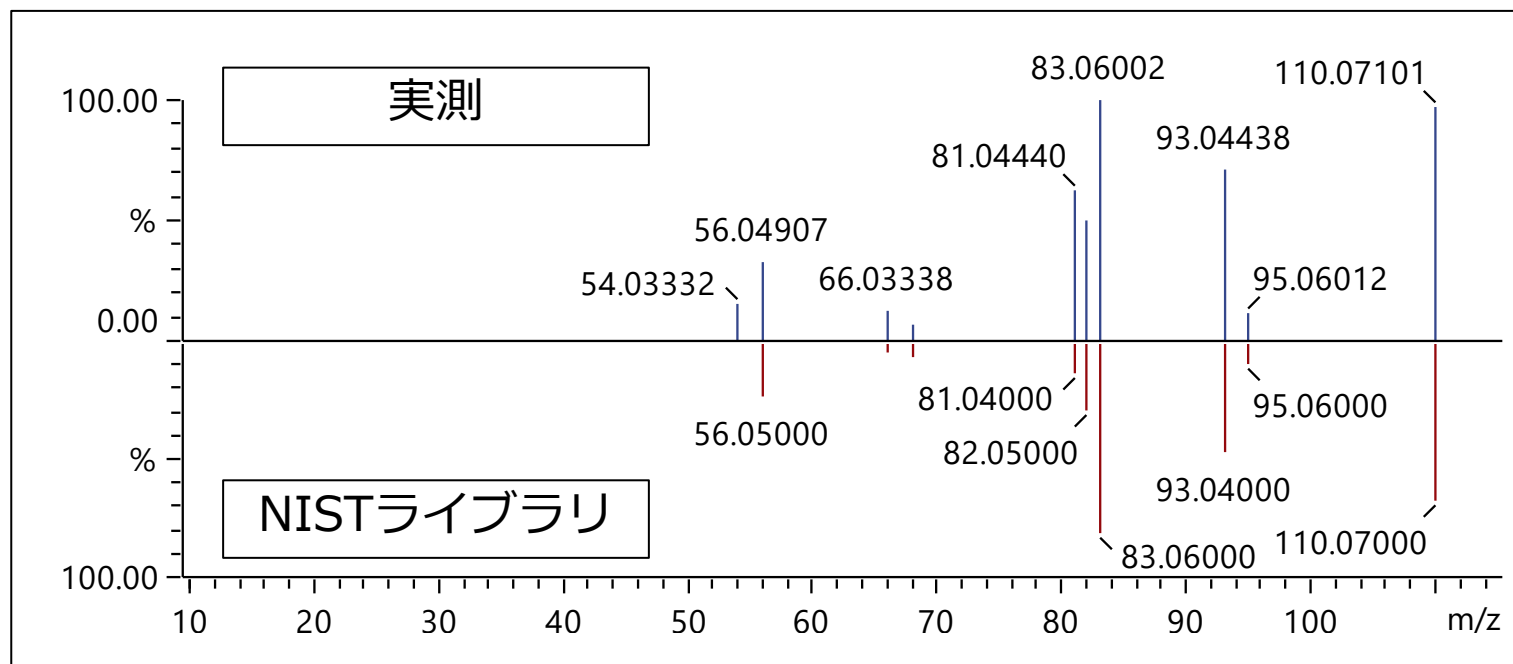
LabSolutions Insight Profilerにより、4,695個のピークが抽出されました。



# アプリケーション：アルコール飲料の分析 –ライブラリ検索–

## MS/MSスペクトルライブラリ検索結果の例

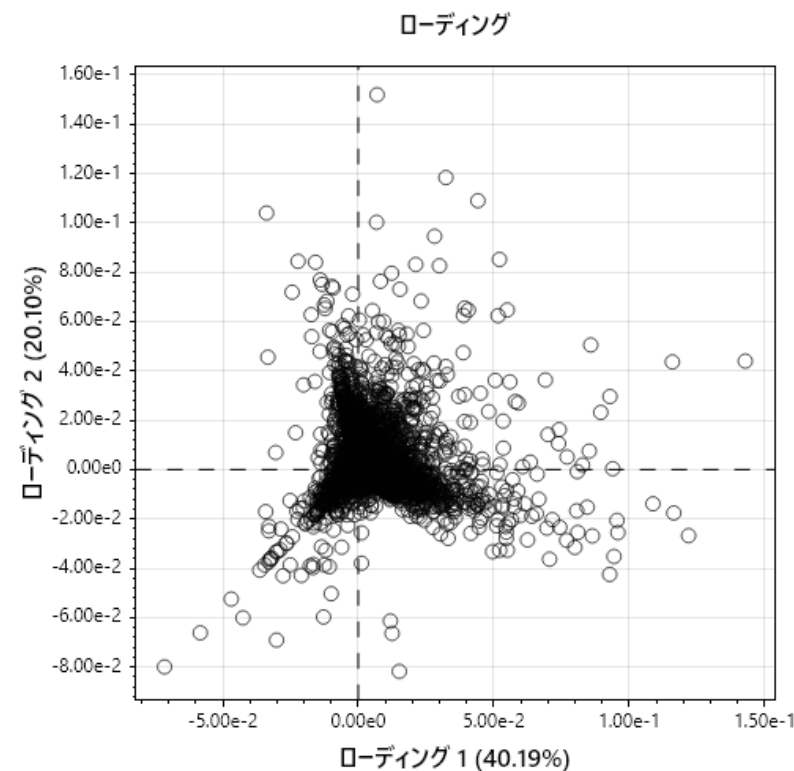
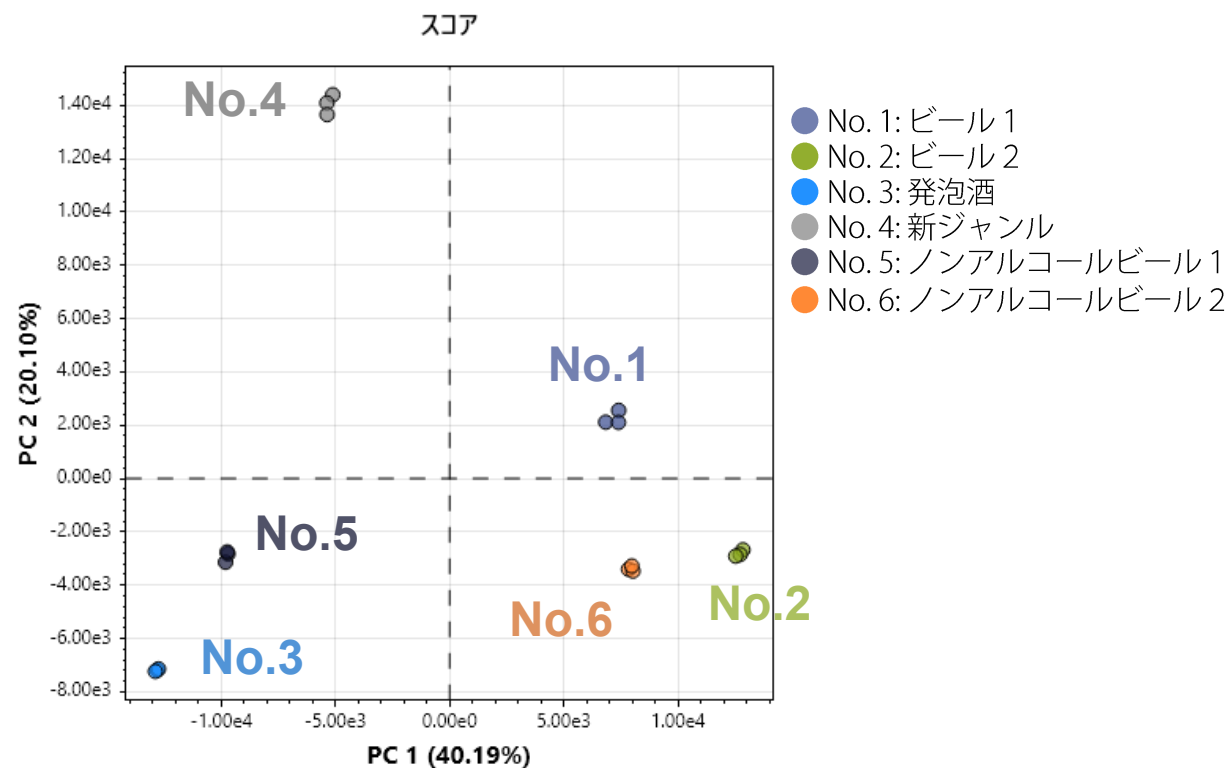
以下の例では類似度83でHistidineがトップでヒット



ライブラリ類似度が50以上の化合物が403個、類似度が80以上の化合物が214個でした。

# アプリケーション：アルコール飲料の分析 –PCA–

4,695個のピークの面積値を使用して、主成分分析（PCA）を実施しました。

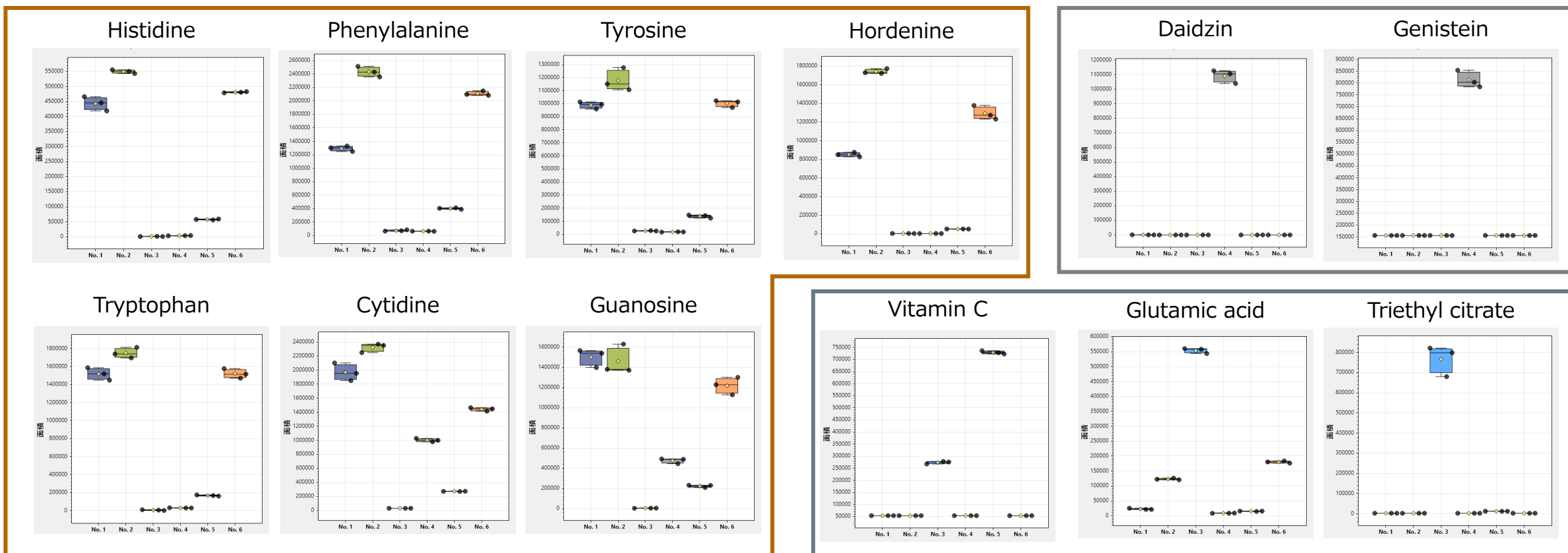


スコアプロットではNo. 1、No. 2、No. 6が近くにプロットされました。  
No. 3、No. 5も近くにプロットされました。  
No. 4は、PC2軸方向で他のサンプルと異なる位置にプロットされました。

# アプリケーション：アルコール飲料の分析 –箱ひげ図–

✓ アミノ酸や核酸代謝物などがNo. 1、2、6に特徴的

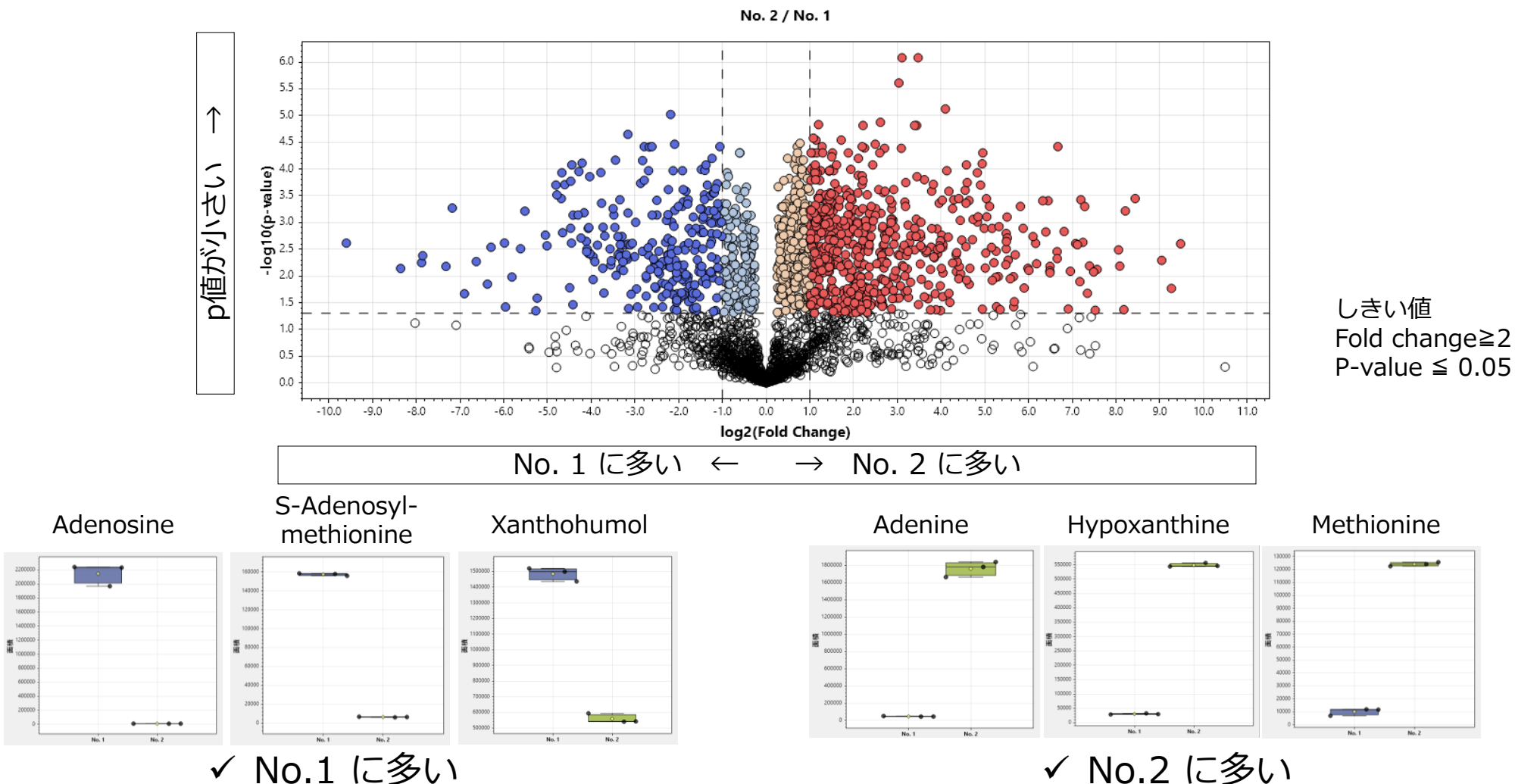
✓ イソフラボンなどがNo. 4に特徴的



✓ ビタミンCやグルタミン酸などがNo. 3、5に特徴的

# アプリケーション：アルコール飲料の分析 –Volcano Plot–

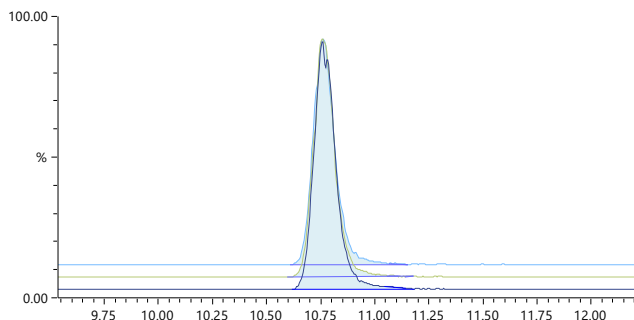
Volcano Plotを用いてビール1（No. 1）とビール2（No. 2）を比較しました。



# アプリケーション：アルコール飲料の分析 –定性解析–

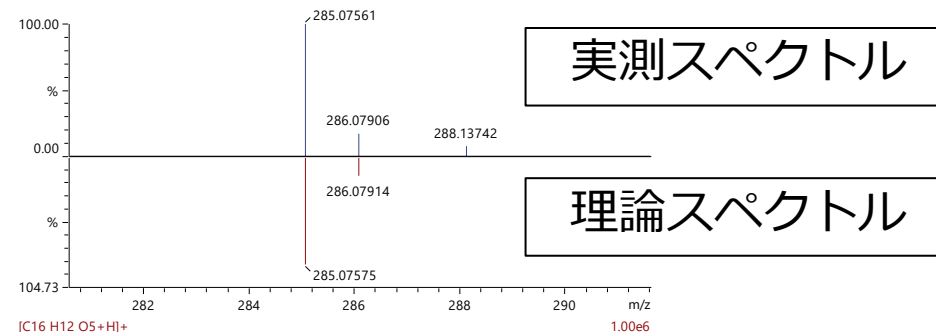
定性解析の例（平均 $m/z$  285.076、保持時間10.8 minのピークに対する解析）

アライメント後のクロマトグラム



このピークはNo. 4のみから検出されました。

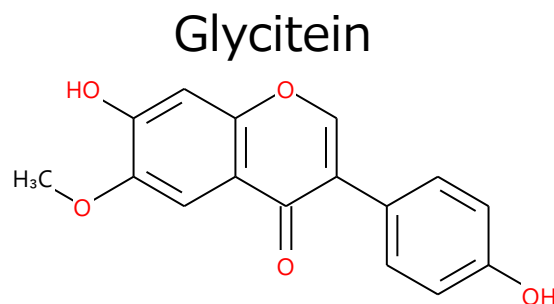
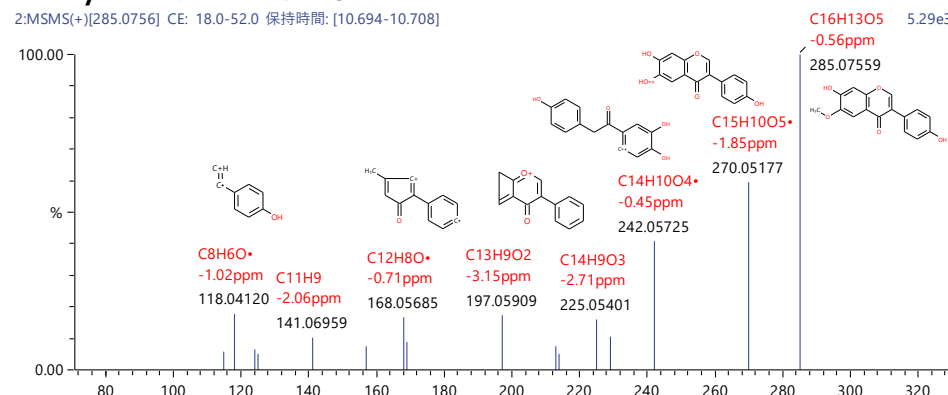
MSスペクトル



$C_{16}H_{12}O_5$ がトップヒットしました。

MS/MSスペクトル

2:MSMS(+)[285.0756] CE: 18.0-52.0 保持時間: [10.694-10.708]



ChemSpiderデータベースを用いたオンライン検索の結果、Reference数が最も多い化合物としてGlyciteinがヒットしました。アサインスコア75でMS/MSフラグメントが帰属されました。

# まとめ



LabSolutions Insight Profilerは、

- ・ 高度なノンターゲット解析を**誰でも簡単に**実行可能
- ・ **複雑なデータを可視化**する様々な機能を搭載
- ・ **定性解析**を支援する多彩な機能を収載

**LabSolutions Insight Profiler**がノンターゲット解析を支援します！



# ご清聴ありがとうございました

Nexera、LabSolutions Insight、LCMS、Shim-pack、Shim-pack Scepter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。

本発表内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、本発表中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。