



**timsTOF™**

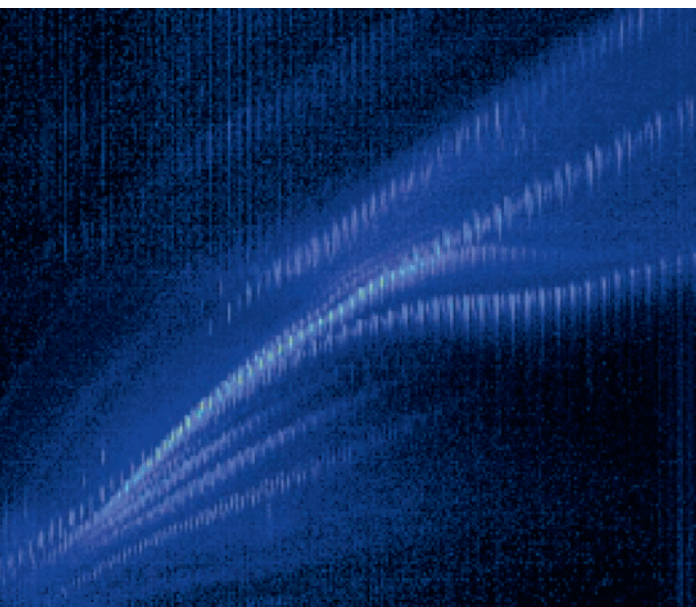
● Flexibility to Empower Your Ideas

Innovation with Integrity

TIMS-QTOF MS

# timsTOF™

柔軟な発想を想いのままに



イオンモビリティは、イオンの3次元構造に関する情報を届け、ピーク容量を増加し、化合物の特性評価の信頼度を高める、質量分析の強力な拡張機能です。

timsTOF™により、Brukerは次世代のイオンモビリティ質量分析を導入します。

timsTOFはブルカーが開発したイオンモビリティ質量分析が適用可能な研究へのオープンプラットフォームで、さまざまな研究分野に応用可能です。

**TIMSとは？**トラップド・イオンモビリティ スペクトロメトリー(TIMS)では、イオンがガス送気によってTIMSトンネルを推進されます。各イオンは、このガス送気から受ける推進力と電場の力が一致する位置を越えて移動しないように、電場によってコントロールされます。電場を小さくすることによって、イオンをそのモビリティに応じて、TIMSトンネルから選択的に解放できます。

**TOF分析部：**分解能50,000（感度および取り込み速度の低下なし）

**TIMSトンネル：**高分解能イオンモビリティ分離(最大200)、最大100%のデューティサイクルに対応するパラレル・アキュムレーション機能付き

**コリジョンセル：**効率的なイオン伝送のために最適化

**四重極：**伝送を改善するための新設計

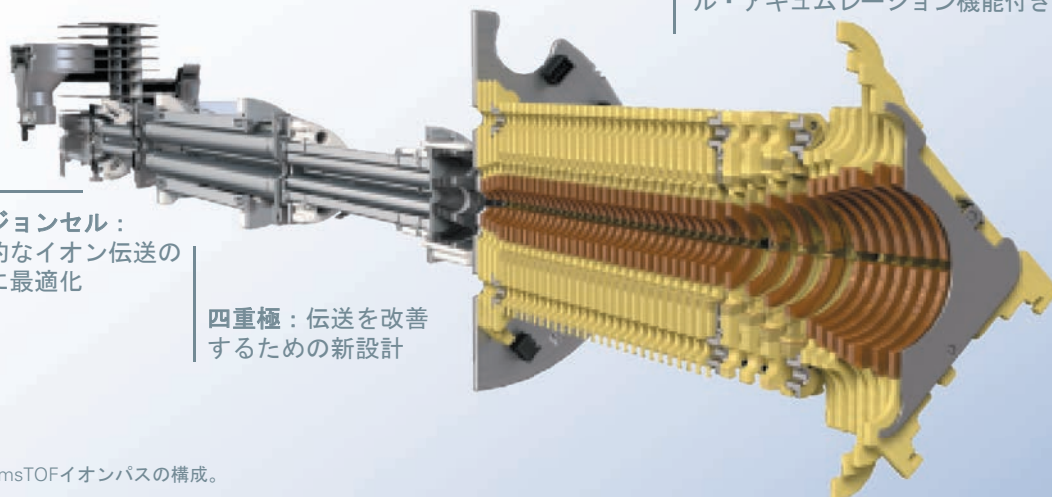


図 1 : timsTOFイオンパスの構成。

# 目的に応じた自由な方法でサンプルを分析することができる柔軟さ

timsTOFでは、高いイオンモビリティ分解能、強力なQTOF性能、分析ワークフローに柔軟性を与える独自の一連の機能が組み合わされています。

## より優れた分離による、より多くの洞察

サンプルの分離を、クロマトグラフィーおよび飛行時間法を超えて、トラップド・イオンモビリティ分離によって増補します。**TIMS**の基本となる独自の原理によって、高分解能が達成され、そのコンパクトさにより、時間や感度を代償にすることなく、オン・オフを切り替えられます。

## コントロールの強化による、レスポンスの増加

**imeX**技術の搭載により、timsTOFのイオンモビリティ分解能を、データ取り込み中に調整でき、対象化合物を拡大して詳細に調べることができます。

## 研究でのご質問、使用する分析ツール

timsTOFで取り込むデータファイルは、オープンソースSQLiteに基づく、理解しやすい、目的に適った分析をサポートするオープン形式(\*.tdf)になっています。データを最大限に活用し、独自のソフトウェアツールを設計し、有意義な分析を実行し、データをまったく新しい方法で可視化します。



# 複雑なサンプルの詳細を完璧なまでに明らかにする分解能

timsTOFは、最大200までの高いイオンモビリティ分解能で、サンプルの複雑さを明らかにし、一般的な質量分析では示されない洞察を提供します。

timsTOFは、高分解能のモビリティ分離によって、直交次元を追加して、ピーク容量が、クロマトグラフィーおよび飛行時間法で達成される分解能を超えて、増加します。分離が不十分なプリカーサーイオンによって決定的なフラグメン

テーション分析が妨げられる場合、timsTOFにより、非常にバックグラウンドノイズが少ないMS/MSスペクトルが生成され、信頼度の高い、明確な同定が可能になります。異性体および同重体化合物でさえ、アクセス可能になります。



**Rouen大学、Carlos Afonso博士**

当ラボでは、すでにイオンモビリティを導入していますが、timsTOFが提供するはるかに高いイオンモビリティ分解能により、この技術に基づくさまざまなアプリケーション応用の幅が広がりました。



## 洞察の最大化

サーベイモードでサンプルを分析して概要を把握し、得られたヒートマップを対話形式の機能を持つソフトで解析します。次にimeXモードを選択して、特定のモビリティ範囲を拡大します。標的のピークセットに重点を置いて、衝突断面積の精密分析を実行することや、超高イオンモビリティ分解能を使って重なり合っているイオンを分離することができます。

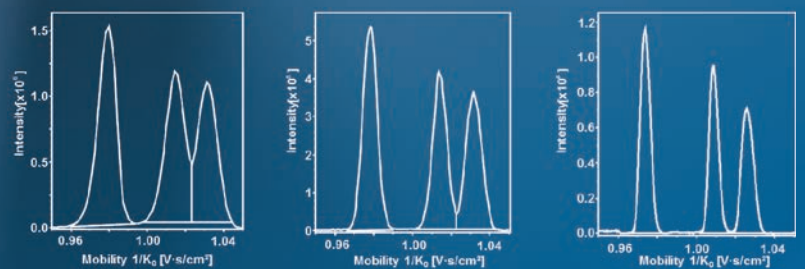


図 2：ラフィノース、メレイトース、マルトトリオースの元素組成は同じ $C_{18}H_{32}O_{16}$ ですが、構造が異なります。imeX技術により、イオンモビリティ分解能を3ステップで調整できます。ここでは、イオンモビリティ分解能最大RP 80（左）、最大RP 120（中央）、および最大RP 185（右）（imeX Ultraモードでのベースライン分離）が達成されました。

## 前例のない詳細さと明確さによる信頼性

timsTOFにより、きわめて正確に測定されたオルソゴナル・クオリファイヤーの拡張セットを使って、化合物同定の信頼度と特異性が強化されます。

timsTOFは、高分解能のイオンモビリティ分離を装備することにより、LC-MS/MSワークフローの深さを増加します。確立されているクロマトグラフィー設定を維持し、対象化合物のベースピーククロマトグラム(BPC)を作成するなど、通常の方法

でデータを調査します。分離が不十分で、複数の物質が重なっている可能性がある化合物を発見するために、モビログラムとヒートマップを用いて精査します。imeX技術により、サンプルに予想もなかった異性体分子が明らかになります。

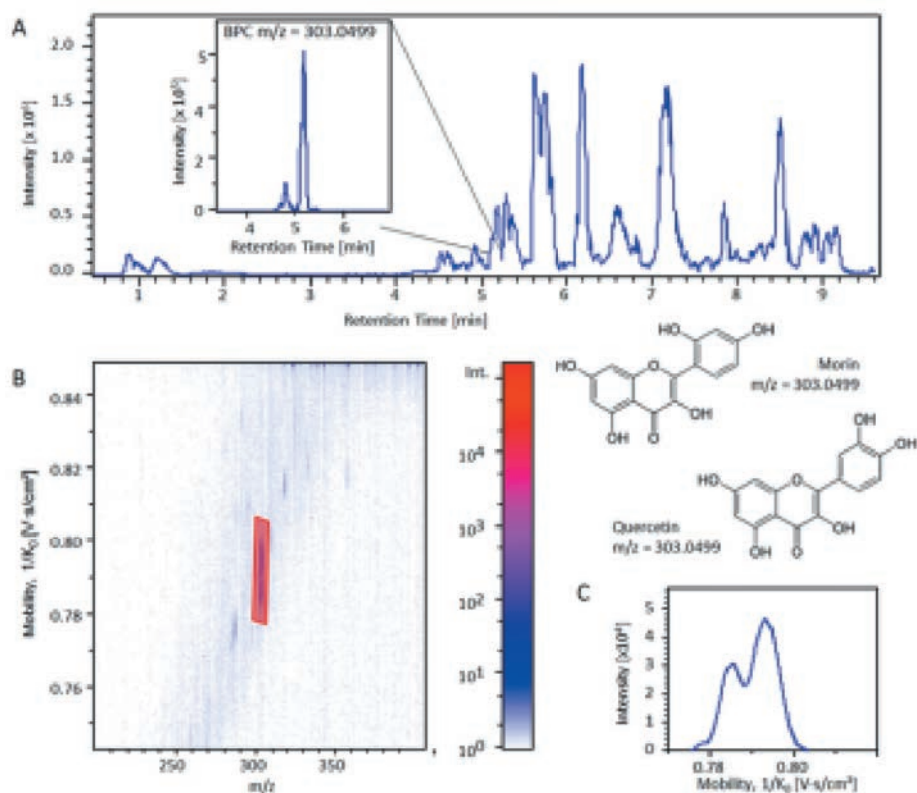


図 3 : LC-MS/MSワークフローでのimeX™ 技術. A. プロポリスサンプルLC/MSのBPC、およびケルセチン $[M+H]^+$ のEIC ( $m/z = 303.0499$ 、挿入図)。B. イオンモビリティと $m/z$ を軸とするヒートマップにおいて、イオンモビリティ軸方向に幅の広いピークを示しており、 $m/z = 303.0499$ での化合物の重なるの可能性が示されています。C. imeX™ Ultra技術により、その高イオンモビリティ分解能を利用して、2つの異性体化合物のわずかな違いによる分離が可能になります。

## 化合物への知見を拡張

timsTOFにより、拡張された化合物ライブラリーを構築でき、これにより、個々のエントリーを、ppmレベルの質量精度、0.5%未満の精度での衝突断面積(CCS)、Brukerの独特の同位体パターン忠実度（真の同位体パターン、TIP）によって、化合物同定が可能。

それぞれのプリカーサーイオンと容易に相関付けられる明瞭なフラグメントスペクトルが、化合物の同定をサポートします。最終的には、あらゆるイオンに対して、この拡張された直交特性分析手法により、分析の柔軟さと信頼度が高まります。

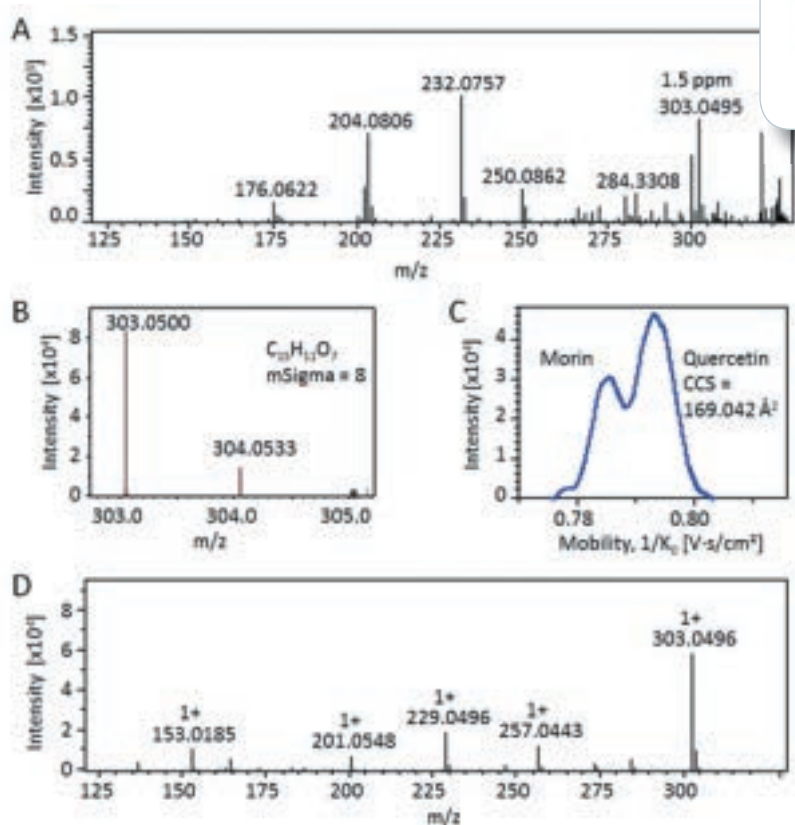


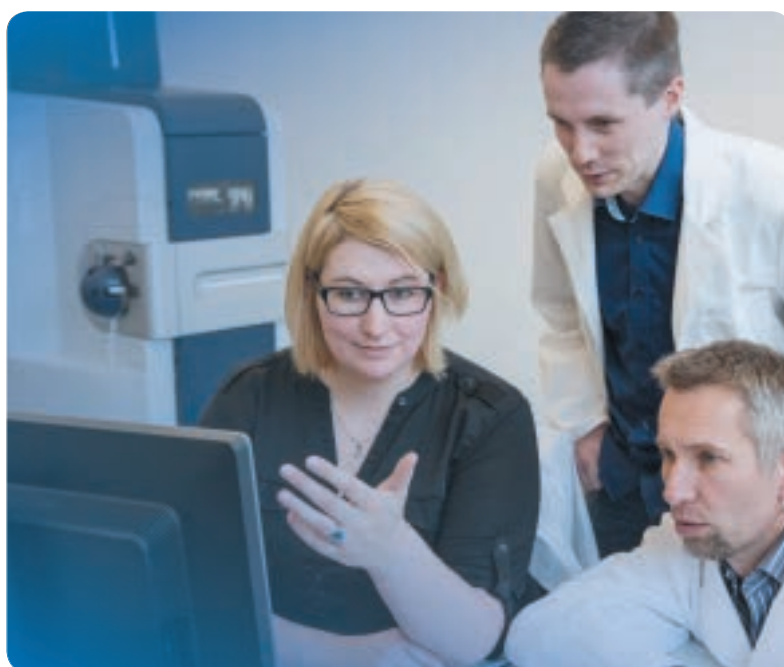
図 4 : TIMSによって化合物同定の信頼度が高まります。A. ケルセチン( $C_{15}H_{11}O_7$ )が含まれている化合物混合物( $[M+H]^+ = m/z$  303.0495)のマスペクトル。B. ケルセチンの理論上の同位体パターンが示されています。精密質量および同位体パターンの品質がmSigma値に反映されています。C. モバイログラムによって、同じ保持時間にイオンモビリティの異なる構造異性体（モリン）が共溶出している事が確認されました。さらに、ケルセチンのCCS（衝突断面積）を決定することもできます。D. TIMS分離後のケルセチン ( $[M+H]^+$ ) をプリカーサとするMS/MSスペクトル。



# timsTOF™

## 柔軟な発想を想いのままに

**DSM Resolve社、Jan Jordens博士**：timsTOFは、使用開始直後から、これまでよりはるかに複雑なデータを提供しており、我々はその中に、予想もしなかった情報を目にしました。このプラットフォームは、サンプルに起きているプロセスや不純物について新しい知見を得るうえで、本当に役立っています。



柔軟性

解決策

信頼度

本製品は研究専用です。診断用ではありません。



ブルカー・ジャパン株式会社

ダルトニクス事業部

横浜営業所  
〒221-0022  
神奈川県横浜市神奈川区守屋町3-9  
TEL: 045-440-0471  
FAX: 045-453-1827  
<http://bruker-daltonics.jp/>

大阪営業所  
〒532-0004  
大阪府大阪市淀川区西宮原1-8-29  
テラサキ第2ビル2F  
TEL: 06-6396-8211  
FAX: 06-6396-1118



詳細についてはQRコードを  
スキャンしてください