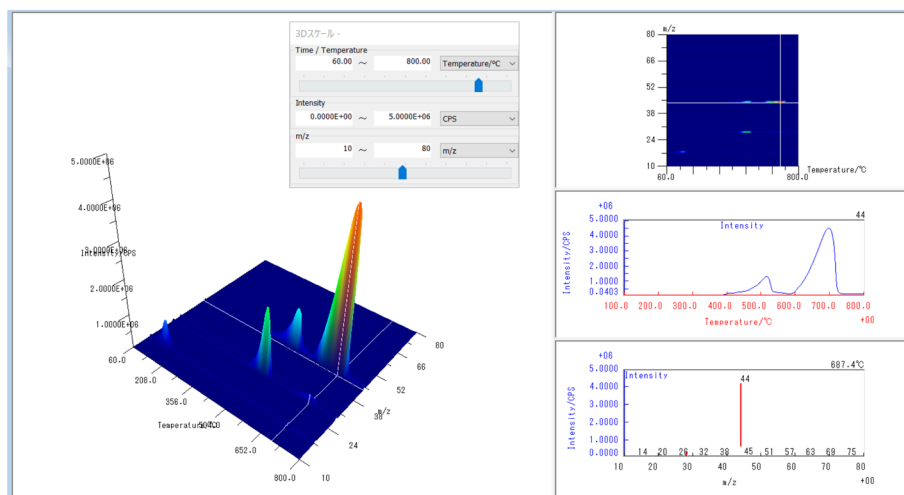


3次元表示・解析ソフトウェア

—発生ガス分析の総合解析環境—



1. はじめに

3次元表示・解析ソフト（以下、3Dソフトと略）は弊社の質量分析計（MS）を用いた発生ガス分析（EGA）の解析を支援するソフトウェアで、Thermo Mass Photo, TG-DTA/GC-MS（注1）、TPD typeR, TPD typeVのデータ解析に使用可能です。EGAのデータ解析では試料温度に対して発生ガス由来のMSシグナル強度をプロットする必要があり、この3Dソフトでは試料温度をMSデータに自動、もしくは簡単な操作で統合でき、さらにEGA解析に便利な様々な機能が提供されます。ここでは3Dソフトの主な特長を紹介します。

2. 主な特長

2.1. 3次元表示

3DメイングラフィックウィンドウではMSデータを温度（または時間）、質量電荷比（m/z）、MSシグナル強度の3軸で3次元表示が可能です。マウスで自由に表示角度を操作でき、各温度域でのMSシグナルの変化の概要を把握するのに役立ちます。さらにこのプロファイルから各温度のマススペクトルやm/zの温度プロファイル（MSイオンサーモグラム）といった2次元での表記を簡単に切り出すことができます。

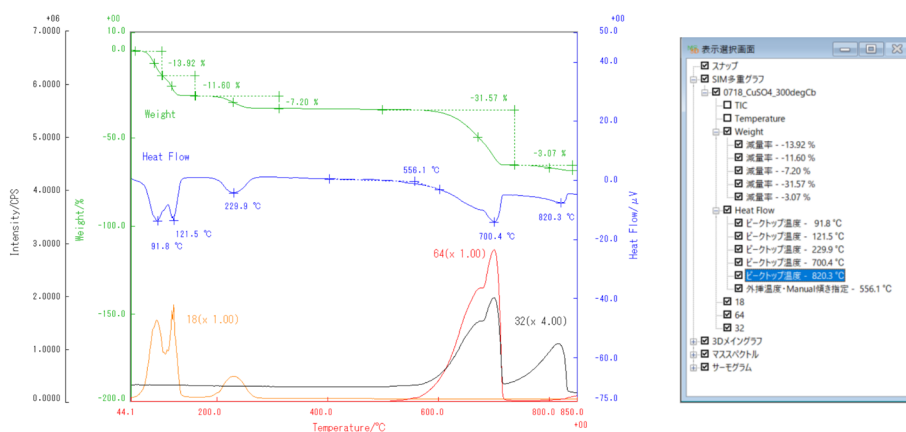


図1. SIM多重グラフと表示選択画面。

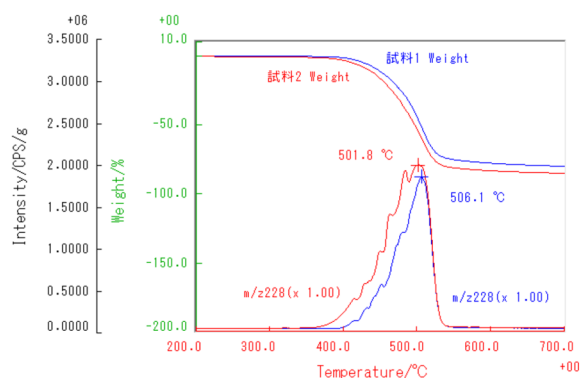


図2. 複数の測定データの表示.

2.2. NISTライブラリ検索

電子イオン化 (EI, イオン化電圧70 eV) で測定した EGA データについては各温度のマススペクトルから NIST ライブラリ検索が可能です (注2). 発生ガスの定性をサポートします.

2.3. TG-DTAとMSイオンサーモグラムの多重表示

SIM 多重グラフウィンドウにて TG-DTA と MS イオンサーモグラムを同じ温度軸上の一つのグラフの中に重ねて表示することができるため、減量や吸発熱反応と発生ガス種との関係を直接的に確認することが可能です. この SIM 多重グラフウィンドウでは TG-DTA および MS イオンサーモグラムの解析が可能となっており、図1に示したように TG の重量変化率や DTA のピークトップ温度、外挿温度を解析することができます. また、MS イオンサーモグラムは各 m/z 毎に表示倍率を選択できるため、強度が大きく異なる場合においても各 m/z の表示倍率を変更することでわかり易く比較することができます. TG, DTA, MS の各データは微分曲線も表示が可能となっており、表示選択画面にて SIM 多重グラフウィンドウに表示させるグラフデータを選択することが可能です.

また SIM 多重グラフウィンドウには複数の測定データを多重表示することができます. 図2のように試料間で発生ガス挙動の違いを確認する際には最適です.

2.4. 面積計算

各 m/z のピーク面積の計算 (時間積分) が可能で、これによりガス発生量の試料間比較が容易になります. 面積計算時のベースラインは1点及び2点で選択可能で、また図3のように任意点毎に面積を分割して求めることも可能です.

2.5. ベースライン補正

MS データに対していくつかのベースライン補正を行うことが可能です. 試料がない状態でサンプル測定と同じ条件で測定したブランクデータを使用してデータを差し引きするブランク補正の他に、指定の温度ま

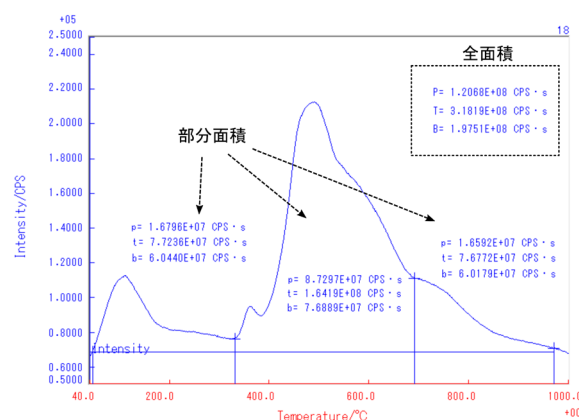


図3. 面積計算. pがピーク部分の面積値.

たは時間データで差し引く方法が選択できます. また、任意の m/z を 0 にすることも可能です. これにより He など雰囲気ガスの m/z を排除して TIC を表示させることが可能です.

2.6. その他機能

TG, DTA 及び MS データに対してスムージング処理が可能です. MS データの縦軸は MS シグナル強度をそのまま表示するだけでなく、検出された最大強度を 100 パーセントとしたパーセント表示や試料重量で割った単位重量当たりの MS シグナル強度の表示、感度係数を用いた規格化が可能です.

その他の基本的な機能として、各データ表示ウィンドウのクリップボードコピーや印刷にも対応しています. また各ウィンドウに対応するアスキーファイル出力も可能で、3D メイングラフからすべての MS データを、SIM 多重グラフから TG-DTA と選択された m/z の MS イオンサーモグラフのアスキーファイルをそれぞれ出力させることができます.

3. おわりに

3D ソフトは EGA 解析を強力にサポートするツールです. 使用事例の動画を下記サイトにアップロードしてありますので、参考にしてください.

(a) 3Dソフト紹介Part1 シュウ酸カルシウム

<https://youtu.be/tzKxQcRzqWE>

(b) 3Dソフト紹介Part2 フィルム

https://youtu.be/KQ-OdDdZ_qY

(注1) GC/MS ソフトウェアにて MS データを netCDF (AIA) 形式に変換し、それを 3D ソフト内で TG-DTA データと統合します.

(注2) 別途 NIST ライブラリ (質量スペクトルデータベース) が必要です.