

名刺でもできる画期的な質量分析法の開発に成功

～質量分析の概念を根底から変える新原理に基づく流体熱力学質量分析（AMA）を開発～

配布日時：平成28年7月14日14時

解禁日時：平成28年7月14日18時

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

概要

1. 国立研究開発法人物質・材料研究機構 若手国際研究センター（ICYS）の柴弘太 ICYS-MANA 研究員と、国際ナノアーキテクトニクス研究拠点（MANA） ナノメカニカルセンサグループの吉川元起グループリーダーは、従来法とは全く異なる質量分析法の開発に成功しました。これは、紙切れの端を手で持ち、そこに一定流量の気体を吹き当てたときに生じる変形量（たわみ）が、気体の分子量によって変わることを利用したもので、気体の分子量を大気中でリアルタイムに測定することが可能になります。一見当たり前にも思えるこの原理は、これまで全く報告されておらず、従来よりも極めて小型で安価な質量分析装置を実現する画期的な発見と考えられます。

2. 質量分析とは、物質の分子量を調べる手法で、田中耕一博士のノーベル賞受賞でも話題となりました。従来、気体の分子量を測定するためには、まず真空中で、気体分子に電子を衝突させるなどして分子をイオン化し、そこに電場や磁場をかけて、分子量に応じて飛ぶ方向が変わることを利用して気体分子量の測定を行います。この基本原理は、最初の質量分析器が20世紀初頭に開発されて以来、田中博士の研究を含め現在に至るまで本質的に変わっていません。これを利用すると、気体の分子量を精密に測定することが可能ですが、原理的に「真空」や「イオン化」が必要であるため、装置の小型化が困難でした。

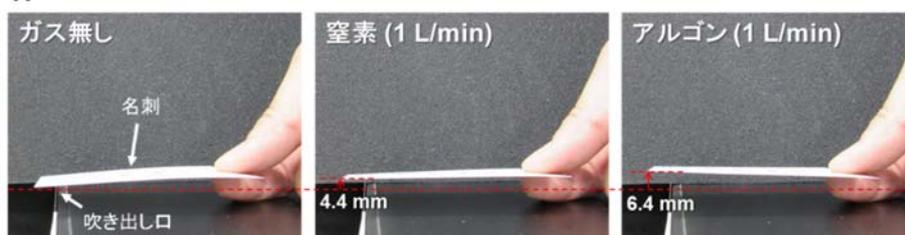
3. 今回、研究グループは、従来の質量分析器とは全く異なる原理を発見し、この原理に基づいて、真空やイオン化を用いることなく、簡便に大気中でリアルタイムに気体分子量が測定できる新たな質量分析法を開発しました。その原理とは、気体分子が片方を固定された構造物に当たるとき、気体分子の重さに応じて構造物のたわみ方が異なるというものです。実際に、シリコン製のマイクロカンチレバー¹⁾ や紙製の名刺を用いて、そこに気体を吹き当てたときに生じる変形量（たわみ）が、気体の分子量によって異なることを実験的に確認しました。下図では、手で持った名刺に対して気体を当てるだけで、そのたわみから分子量が決定できることを示しています。このたわみと気体分子量との関係について、流体力学・熱力学・構造力学を融合することで定式化に成功し、理論的にもこの原理が正しいことを証明しました。これを元に、本手法を「流体熱力学質量分析（Aero-Thermo-Dynamic Mass Analysis, AMA）」と命名しました。

4. 今後、この成果に基づいて、携帯可能な小型質量分析デバイスを作製し、健康管理、環境モニタリング、防災など一般社会への応用のほか、ガスクロマトグラフィー²⁾ との融合や、工場でのプロセス管理など、産業界への展開も推進していきます。

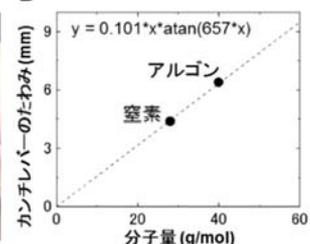
5. 本研究は、科学研究費補助金若手研究（A）（課題番号:23685017）、公益財団法人東電記念財団研究助成（基礎研究、No.13-005）の研究の一環として行われました。

6. 本研究成果は、Scientific Reports 誌オンライン版に2016年7月14日（現地時間）に掲載されます。

A



B



A) 手で持った名刺に対して窒素およびアルゴンを一定流量で吹きかけた際の様子。B) A で得られたたわみを分子量に対してプロットした図。破線で示す解析解と良く一致していることが分かる。

研究の背景

質量分析は、物質の分子量を調べる手法で、ガスクロマトグラフィーなどと組み合わせることで様々な試料の種類や構造も同定することができ、その活躍の場は食品、環境、医療、農業、化粧品、犯罪捜査など多岐に渡ります。20世紀初頭に世界初の質量分析器が開発されて以来、最新のマトリックス支援レーザー脱離イオン化法 (MALDI 法) に至るまで、質量分析の原理は常にイオン化と共にありました。イオン化には真空装置が必要であるため、質量分析器は今なお高価かつ大型であり、専門の研究・分析機関における分析機器として利用されるにとどまっていた。近年、イオン化を必要としない質量分析法も開発されていますが、やはり真空環境や高周波数測定などが必要であり、従来の質量分析法と同様に小型化が困難でした。このようなイオン化や大型装置、真空環境といった従来技術の抱える諸課題が解決されれば、モバイルデバイスへ実装することにより、個人レベルでも利用可能な質量分析器として、爆発的な需要と、従来用途にとどまらない多様な展開が期待されます。そのため、これまでに無い原理に基づく革新的な質量分析手法の開発が望まれていました。

研究内容と成果

本研究では、気体の分子量を大気中でリアルタイムに直接測定可能な全く新しい手法を、世界で初めて開発することに成功しました。本研究の実験では、マイクロカンチレバー (MCL、髪の毛ほどの大きさの片持ち梁) に、常温・常圧下で様々な気体試料 (ヘリウム、窒素、空気、アルゴン、二酸化炭素) を一定流量で吹きかけ、その際に生じる機械的な変形量 (たわみ) が、特有の値となることが確認されました。さらに、流体力学・熱力学・構造力学を組み合わせることによって、気体の分子量とカンチレバーの変形量との関係を表す式を導き出すことに成功しました。この「流体熱力学質量分析 (Aero-Thermo-Dynamic Mass Analysis, AMA)」と命名した新手法の科学的妥当性を異なるアプローチにより多角的に検証するため、実験により得られる変形量と、有限要素解析³⁾によるシミュレーションから導かれる値、および本研究で定式化に成功した解析解から算出される値を比較し、これらが良く一致することを確認しました (図 1)。

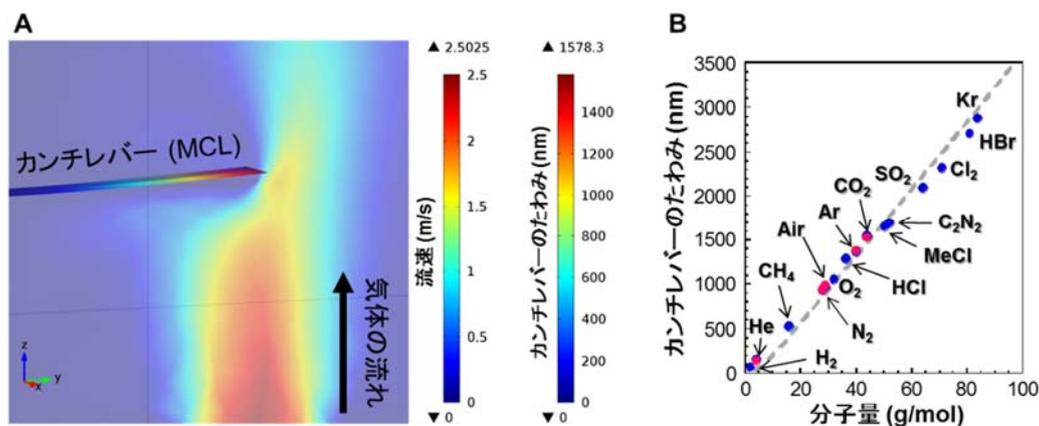


図 1 A) 有限要素解析によるシミュレーション結果。MCL に対して下方向から気体試料を吹きかけている。B) 様々な気体試料の分子量と MCL のたわみの関係。灰色の破線で示す解析解と赤丸の実験値、青丸のシミュレーション値が良く一致している。

今回の実験では、MCL のわずかな変形量を測定するために特殊な顕微鏡を使用していますが、物理的な変化に応じて電気抵抗が変化するピエゾ抵抗⁴⁾などを MCL に組み込むことで、顕微鏡を使うことなく電気的に変化量を測定できます。さらに、本手法では、真空環境・イオン化・大型装置などを一切用いないため、将来的にモバイル機器に搭載可能なレベルの小型化が期待できます。

本手法の気体識別能力を確認するため、分子量の差が 1 g/mol に満たない窒素 (28.01 g/mol) と空気 (28.97 g/mol) の測定を行いました。図 2 に示すように、このように僅かな分子量の差であっても両者を明確に区別可能であることが確認できました。さらに、空気と窒素を 1:1 の割合で混合し、平均分子量 28.49 g/mol とした場合であっても、窒素および空気と区別できることを実証しました。シグナル・ノイズ比から計算すると、本研究で用いたセットアップでは 0.04 g/mol の違いまで識別可能です。さらに、前述の解析解を参考にして MCL や流量などを最適化することで、識別能力の大幅な向上が期待できます。

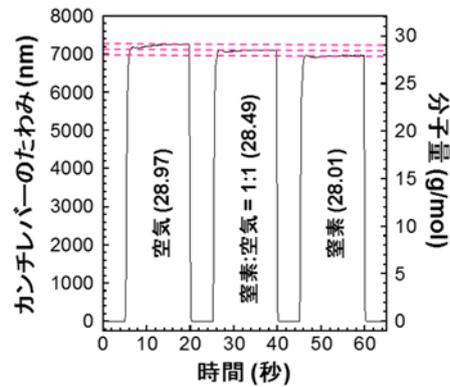


図2 MCL に対して空気、窒素、および空気と窒素の 1:1 混合気体を吹きかけた際のたわみを示す図。3 者の分子量の違いは僅かだが、たわみの大きさが明確に違う。

本手法を応用すると、管などから吹き出す気体について、出口の周囲で濃度を測定することにより、気体の流れを簡単に可視化することが可能になります (図3)。また、本手法は気体試料を対象とした質量分析法ですが、液体試料でも、気化することによってその分子量を決定することが可能です。一例としてペンタン、ヘキサン、ヘプタンという、室温で液体状態の 3 種類の分子を気化し、一定流量で MCL に吹きかけたところ、そのたわみから分子量が算出できることを実証しています。

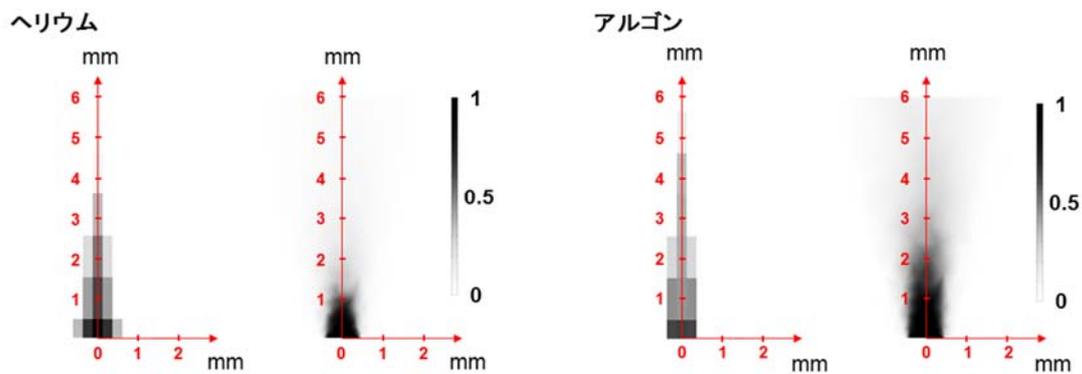


図3 ヘリウムおよびアルゴンが大気中へ噴出する様子を本手法により可視化した図。各気体試料において、左が実験結果、右がシミュレーション結果を示している。

本手法の原理は汎用性が高いため、MCL に限らず、様々な物が利用可能です。一例として、MCL の代わりに手で持った名刺を利用した質量分析の様子を図4 に示しています。一定流量の窒素とアルゴンを名刺に吹きかけると、解析解によって計算される名刺のたわみ量から、それぞれの分子量を知ることができます。このように、本手法は実環境下において誰もが簡単に実施可能であり、研究用途にとどまらない広い応用展開が期待されます。

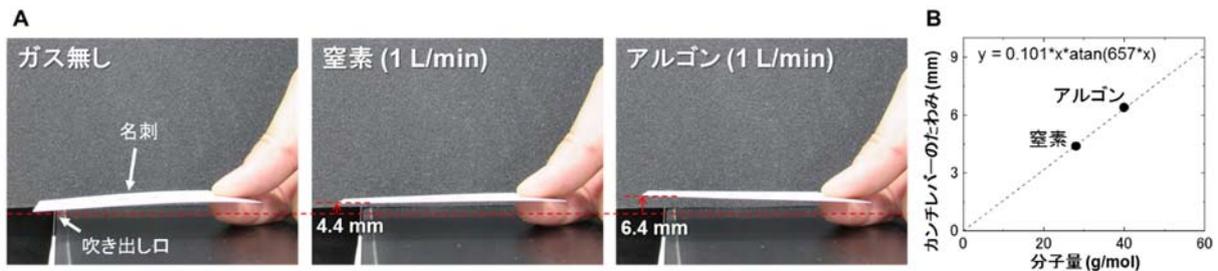


図4 A) 手で持った名刺に対して窒素およびアルゴンを一定流量で吹きかけた際の様子。B) A で得られたたわみを分子量に対してプロットした図。破線で示す解析解と良く一致していることが分かる。

以上、本手法は従来の質量分析法には見られなかった様々な特長を有することが分かりました。一方で、本手法では分子量の情報のみが得られるため、同じ分子量で構造が異なる分子を見分けることができないといった側面もあります。参考のため、従来型の質量分析方法との比較を表1に示します。

表1 本手法と従来型の質量分析方法の特徴比較

	イオン化による従来型質量分析	流体熱力学質量分析「AMA」(本手法)
分子量の直接測定	×	○
分子構造の同定	○	×
大気中での測定	×	○
リアルタイム測定	○	○
小型化	△	○

今後の展開

本手法「AMA」をモバイルデバイスへ実装すれば、個人レベルでも利用可能な質量分析器が実現し、それに伴う爆発的な需要と、従来用途にとどまらない多様な用途展開が期待されます。より具体的には、従来の質量分析器でカバーされていた食品、環境、医療、農業、化粧品、犯罪捜査などに加え、分子量に基づく健康管理（呼気による健康チェック、口臭／体臭測定など）、環境モニタリング（エアコンでの室内環境測定や動植物の状態管理など）、防災（危険ガスの漏出チェックなど）など、質量分析の新たな応用が期待できます。また、研究用途としては、ガスクロマトグラフィーと組み合わせる事で、多成分の気体試料についても簡便な装置で成分分析を行えるようになることが期待されます。今後は、実用化に向けて小型デバイスを作製し、上述した様々な分野でのオンサイト・リアルタイム測定を想定し、その実現可能性を検証していく予定です。

このほか、これまで何気なく眺めていた「風に揺れる木々」なども、実は空気の分子量を反映しているということが分かるようになることで、物事を多角的に検証することの面白さや重要性を再認識するきっかけになることが期待されます。

掲載論文

題目：Aero-Thermo-Dynamic Mass Analysis

著者：Kota Shiba and Genki Yoshikawa

雑誌：Scientific Reports

掲載日時：2016年7月14日午前10時（現地時間）

用語解説

- (1) マイクロカンチレバー：カンチレバーは片持ち梁（プールの飛び込み板のように、一端が固定された梁）を意味する。本研究では髪の毛ほどの大きさの小さな（マイクロ）カンチレバーを使用した。
- (2) ガスクロマトグラフィー：気化しやすい試料の分析に用いられる手法の一つ。カラムと呼ばれる細管に、多くの場合、複数成分からなる試料を一定流量で導入し、カラム内部に固定された物質と試料を構成する分子との化学的親和性の差を利用して、各成分を分離する。ガスクロマトグラフィーの出口に質量分析器を置くことで、各成分の同定も可能になる。
- (3) 有限要素解析：数値解析手法の一つ。構造体を複数の微小なドメインに分割し、各ドメインの変化を求め、それらを近似的に統合することにより全体の変化を見積もる方法である。解析的に解を導くことが不可能な場合にも有効な手段である。
- (4) ピエゾ抵抗：応力を受けるとその電気抵抗率が変化する物質のこと。このピエゾ抵抗をカンチレバーなどに埋め込んでおくことで、カンチレバーのたわみ量を、抵抗値の変化として電氣的に簡単に読み取ることが可能になる。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 若手国際研究センター (ICYS)

ICYS-MANA 研究員 柴 弘太 (しば こうた)

TEL: 029-860-4603

E-mail: SHIBA.Kota@nims.go.jp

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトゥクス研究拠点 (MANA) ナノライフ分野
ナノメカニカルセンサグループ

グループリーダー 吉川 元起 (よしかわ げんき)

TEL: 029-860-4749

E-mail: YOSHIKAWA.Genki@nims.go.jp

URL: <http://y-genki.net>

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 経営企画部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp