



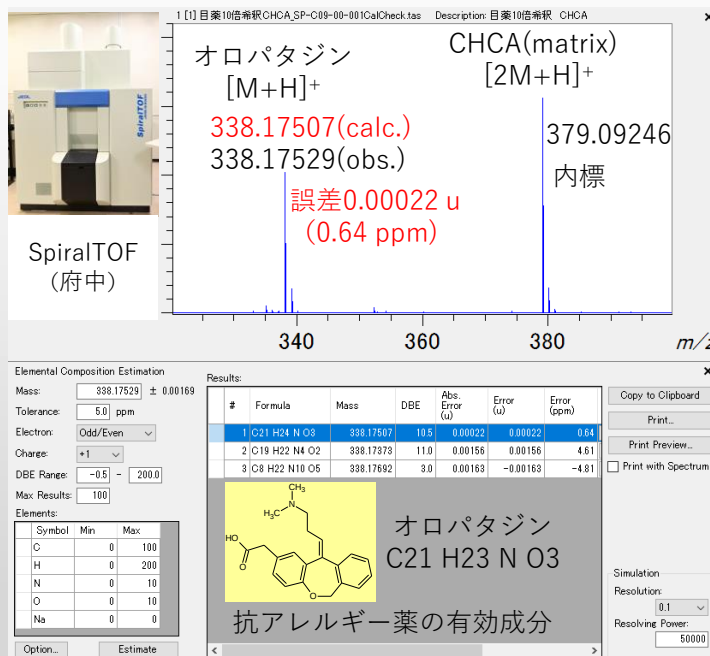
2022年12月13日

論文投稿を意識した有機化合物の精密質量測定

スコップの質量分析計部門をご活用いただき有難うございます。第4号のNEWS LETTERではLC-MS/MSを用いた蛋白質同定例を掲載し、既に200検体を超える試料の分析支援を実施しました。スコップの質量分析は蛋白質・ペプチドの分析に限らず、有機低分子、合成ポリマー等々、幅広く対応します。ので、順次紹介致します。今回の話題は「精密質量測定」です。知識と技術で再現できる科学分析ですから、誤差の大小は運ではなく、必ず理由があります。正しい理解には、適切なキャリブレーションが必須です。

MALDI SpiralTOF (JMS-S3000)

目薬成分の精密質量測定・組成推定



目薬の測定・組成推定例です。イオン化用matrixであるCHCAは既知物なので、そのイオンをキャリブレーションにも用いました。1 ppm程度の質量精度が得られると、論文投稿にも、未知低分子化合物の組成推定にも有用です。

精密質量測定は府中 (MALDI・ESI)、小金井 (ESI・FAB・EI) の各機器で対応しています。

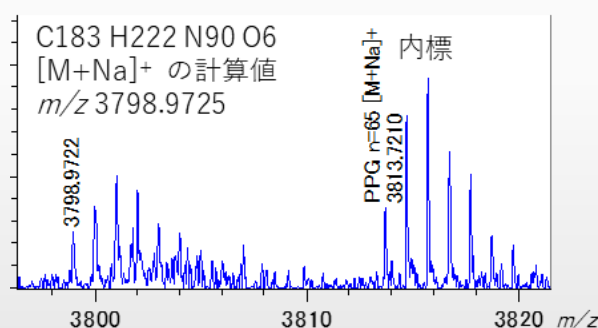
各種「値」の正しい取り扱い (同位体・ChemDraw・理論値・実測値・キャリブレーション)、質量精度を担保する質量分解能の役割、組成推定が有効な範囲等々、正しい理解で積極的に活用してみませんか。

質量分析計利用の方は窓口担当scoop-groups@go.tuat.ac.jpまでお問合せ下さい。

投稿規定が求める精密質量測定精度の例

“The structures of compounds are expected to be supported by **high-resolution mass spectrometry (error limit 5 ppm or 0.003 m/z units)** or **elemental analysis.**” これは *Journal of Natural Products* の投稿規定の抜粋です。新規物質の構造決定や有機合成の分野では、論文投稿の際に**元素分析**のかわりとして**精密質量測定**が広く用いられてきました。精密質量測定は、分析試料が混合物でも各成分の情報が得られます。また秤量不要なので、極微量試料や吸湿性試料などにも対応しやすい利点があります。

少し大きい化合物 (分子量約3800) の測定例



合成化合物 (予定構造の組成はC₁₈₃H₂₂₂N₉₀O₆) の測定例です。検出が難しい状態から開始し、各種条件検討を経て、誤差0.0003 uの高い質量精度でデータを取得しました。この測定は、試料と内標 (ポリプロピレングリコール: PPG) を混ぜて測定した内部標準法の例です。

高分解能ESI-MS(/MS)



Orbitrap(府中)



TOF(小金井)

LC-MSによる多成分試料の分析、錯体分析など、ESIイオン化が適した対象でも精密質量測定がご活用いただけます。