

飛行時間型質量分析装置を用いた有機化合物の構造・組成解析について

1. 質量分析装置とは

質量分析装置は、試料をイオン化し、その質量電荷比 (m/z) を求めることにより、未知物質の質量数を求めることができます。しかし、質量分析装置にも様々な種類があり、分析目的によって使い分けされています。

未知の有機化合物の構造・組成解析には、高分解能測定によるイオンの精密質量測定、及び MS/MS 測定によるプロダクトイオンの解析が有用な手法としてあげられます。

従来は、質量分析装置による精密質量測定を行う際には、磁場型の質量分析装置が利用されてきました。しかし、磁場型質量分析装置での精密質量測定は、分解能と分析感度が両立しないため、高分解能条件では分析感度が低いという問題がありました。

一方、飛行時間型質量分析装置（以下、TOFMS）は、非常に広範囲な質量を測定することができ、分解能も TOFMS の飛行距離により決定されるため、高感度な精密質量測定が可能です。

2. クロマトグラフィーとは

質量分析装置は、複数試料を分離する機能を有していないため、導入装置として様々なクロマト装置を結合して使用します。

クロマト装置は、「カラム」と呼ばれる部分で、物質の大きさや吸着力、電荷などの違いを利用した移動速度の差で分離を行います。当センターでは、液体クロマトグラフ（LC）、イオンクロマトグラフ（IC）、キャピラリー電気泳動（CE）の3種類のクロマト装置を用いています（図1）。

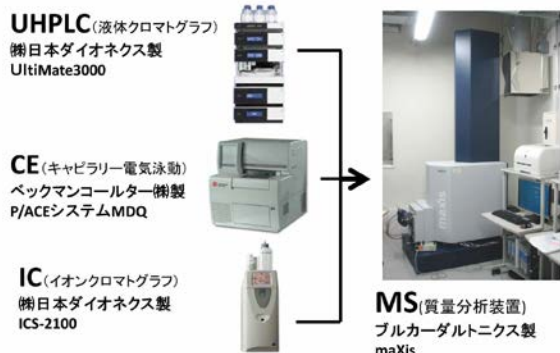
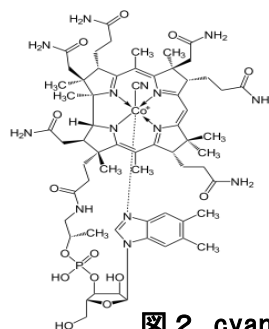


図1 質量分析装置構成図

3. 測定事例

今回は測定事例として、cyanocobalamin（ビタミンB₁₂）の測定事例を紹介いたします。cyanocobalaminの化学構造は図2のとおりです。



cyanocobalamin

化学式：C₆₃H₈₈CoN₁₄O₁₄P
質量数：1354.56
理論値：1355.5747 [M+H]
CAS No：68-19-9

図2 cyanocobalaminの化学構造

cyanocobalamin を ESI-positive モードで測定した結果（MS 測定、MS/MS 測定）を図3、図4に示します。

測定の結果、 m/z 1355.5751 のプリカーサーイオンを検出しました。理論値との誤差は0.4mmuです。このプリカーサーイオンを用いて組成解析を行ったところcyanocobalaminの組成であるC₆₃H₈₈CoN₁₄O₁₄Pが最上位で組成推定されました。また、MS/MS測定から得られたプロダクトイオンにより、構造解析を行うために有用な情報を得ることができました。

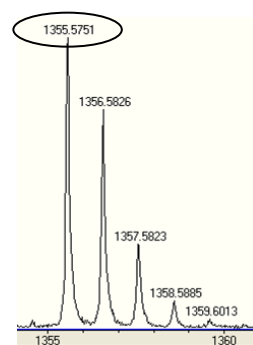


図3 MSスペクトル

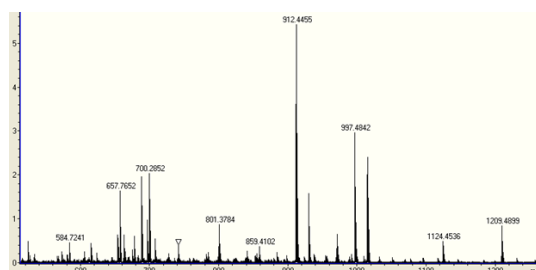


図4 MS/MSスペクトル

4. まとめ

以上のように、TOFMSを使用することで、精密質量測定・組成解析を精度良く行えることがわかりました。当センターでは TOFMS による依頼試験を実施しています。



共同研究支援部 船越 吾郎 (0561-76-8315)
研究テーマ：有機分析、食品分析
担当分野：質量分析