

JMS-S3000 Application Data

JMS-S3000“SpiralTOF”を用いた 低分子量有機化合物の精密質量測定

MALDI-TOFMSは分子量の大きな化合物(生体高分子、合成高分子など)の分析で活躍しているが、低分子量化合物の分析も可能である。広いマスレンジで高い質量精度の分析が可能な SpiralTOF 光学系と、MALDI イオン源からなるJMS-S3000を用いて、既知の低分子量有機化合物を対象とした精密質量測定および組成推定のモデル実験を行った。

測定試料は Diphenhydramine (ジフェンヒドラミン)、マトリックスは α -Cyano-4-hydroxycinnamic acid (CHCA) を用いて測定を行った。弊社独自の解析用ソフトウェア“msTornado Analysis”に測定データを読み込み、組成推定を行った際の作業画面を Fig.1 に示す。

Fig.1【A】に示すマススペクトルには、マトリックスとして用いたCHCAのシグナルの他に、 m/z 256 にジフェンヒドラミンのシグナルが見られる。マトリックス由来のシグナルを用いて内部標準法でキャリブレーション後、ジフェンヒドラミンの精密質量測定結果を m/z 256.1687 (monoisotopic ion) として得た。得られた値に対して、Fig.1【B】に示す条件で組成推定を行ったところ、設定した条件を満たす元素組成は、Fig.1【C】に示すように $C_{17}H_{22}NO$ のみであり、計算値と実測値の差は 0.001(u) 未満であった。今回測定に用いたジフェンヒドラミンは

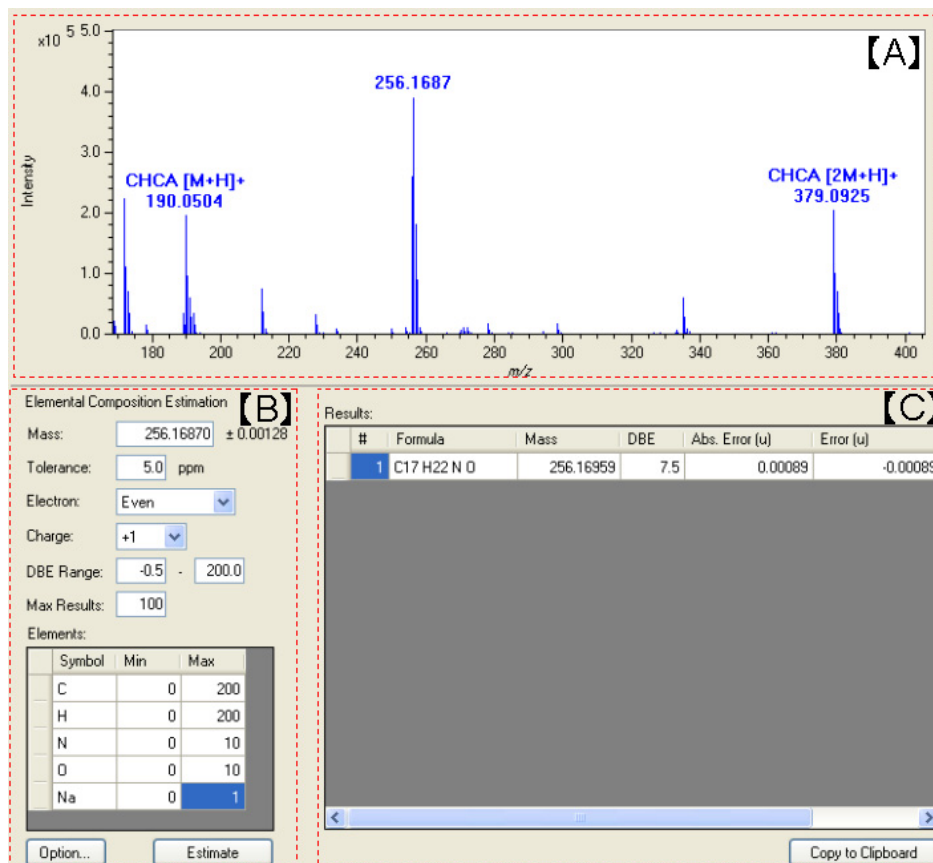


Fig.1 “msTornado Analysis” software windows

Fig.2 に示す構造であり、その組成は $C_{17}H_{21}NO$ なので m/z 256.1687 は ジフェンヒドラミンの $[M+H]^+$ であることが確認できた。

JMS-S3000“SpiralTOF”を用いると、未知の有機低分子量化合物であっても、組成推定を目的とした高い質量精度の分析が可能であると言える。

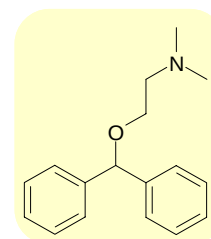


Fig.2 The structure of
Diphenhydramine
($C_{17}H_{21}NO$)