

JMS-S3000 Application Data

JMS-S3000“SpiralTOF” TOF-TOF オプションを用いた トリステアリンの解析例

トリステアリンは、トリアシルグリセロールの 3 つの脂肪酸が、全てステアリン酸となった構造を有する (Fig.1). 今回この物質を擬似試料とし、JMS-S3000 SpiralTOF の TOF-TOF オプションを用い、プロダクトイオンスペクトルを測定することにより、High Energy CID (HE-CID)の有用性を評価した。

メタノールに溶解させた試料に NaI を加えて、Spiral モードで測定したところ (Fig.2), m/z 913.8231 の位置にピークが観測された (外標として PEG 1000 を使用した). これは、トリステアリンの Na 付加体のモノアイソトピックイオンと推定される (計算値: 913.8194). 次に TOF-TOF モードに切り替え、このピークのプロダクトイオンスペクトルを測定した (Fig.3). グリセリンに付加した Na 近傍にチャージが固定されるため、チャージリモードフラグメンテーション (CRF) 由来と思われる規則的なピークが観測されている. m/z 650-920 付近を拡大すると (Fig.4), ステアリン酸の構造を反映した規則的な等間隔のピークが観測されており (Fig.5), この領域では 3 つのステアリン酸の内、1 つで開裂が起こったフラグメントイオンが観測されている。

以上のように、TOF/TOF オプションを用いることで、HE-CID でしばしば見られるチャージリモートフラグメンテーション由来のピークが明確に観測され、構造解析を容易に行うことが可能となる。

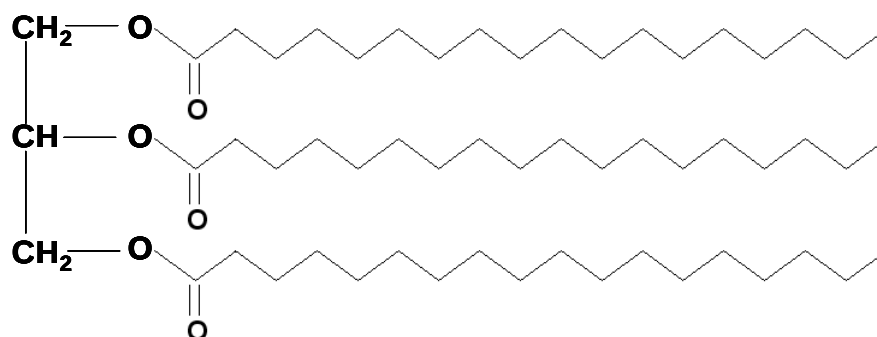


Fig.1 Structure of tristearin.

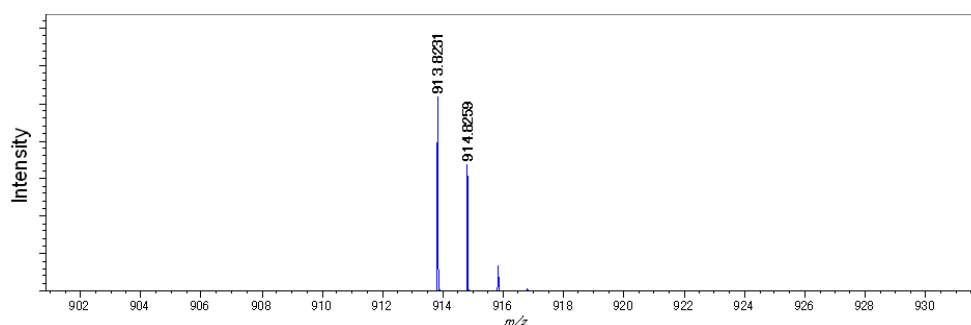


Fig.2 Mass spectrum of tristearin.

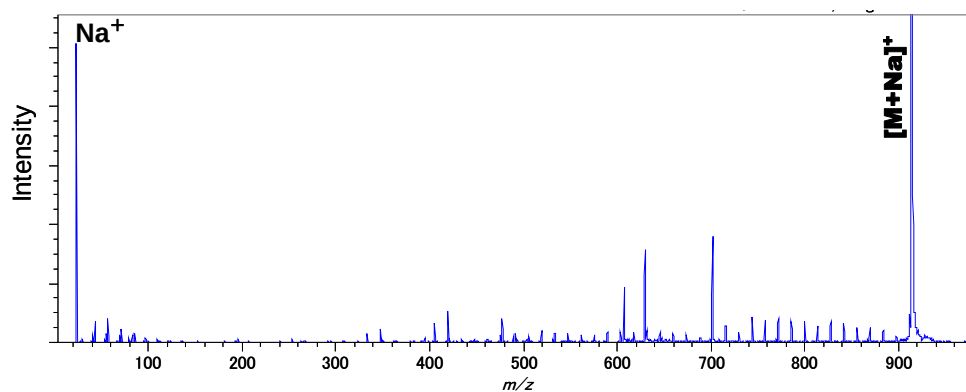


Fig.3 Product ion spectrum of sodium adducted tristearin.

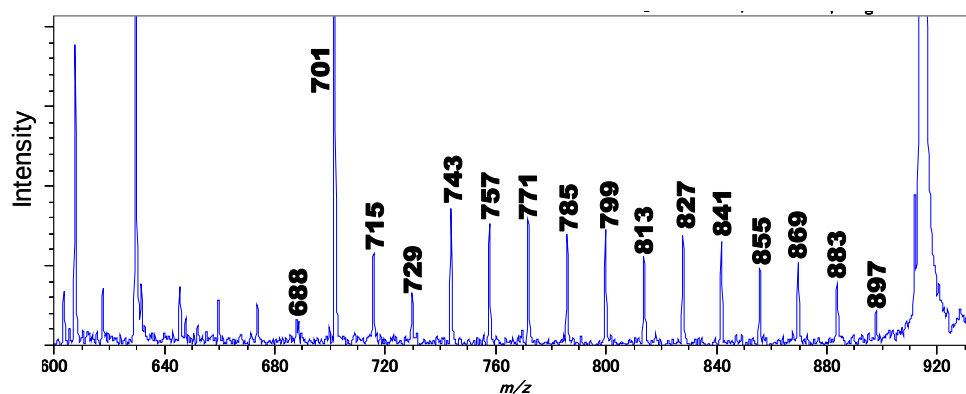


Fig.4 Product ion spectrum of sodium adducted tristearin(enlarged between m/z 650 and m/z 920).



Fig.5 Peak assignment of obtained product ion spectrum.