

JMS-S3000 Application Data

JMS-S3000“SpiralTOF” TOF-TOF オプションを用いた トリオレインの解析例

トリオレインは、トリアシルグリセロールの 3 つの脂肪酸が、全てオレイン酸となった構造を有する (Fig.1). 今回、この物質を JMS-S3000 SpiralTOF の TOF-TOF オプションを用いて、プロダクトイオンスペクトルを測定した。測定の結果、炭素鎖中に不飽和結合を 1 つ持つオレイン酸の構造を反映したチャージリモートフラグメンテーション (CRF) 由来ピークが観測できることを確認した。

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 907.7782 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、トリオレインの 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: 907.7725)。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、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 600-920 付近を拡大すると (Fig.4), m/z 891 から m/z 807 までは以前報告したトリステアリンと同様に^[1]14 間隔のピークが観測されており、単結合で炭素が結合していることがわかる。 m/z 807 から m/z 753 の間のピークは他に比べると強度が弱くなっており、ここに不飽和結合が存在することがわかる。また、 m/z 807 から +1 の位置にあたる m/z 808 のピークも観測されており、これについても不飽和結合が存在するときに特有のピークとされている^[2]。 m/z 753 から m/z 697 までは 14 間隔のピークが再び観測されており、単結合で結合していることがわかる。各ピークをアサインすると Fig. 5 のようになり、トリステアリンと同様にこの領域では、3 つのオレイン酸のいずれか 1 つで結合の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 オプションを用いた高エネルギー CID 測定を行うことで、CRF 由来のピークが明確に観測され、炭素鎖中の不飽和結合位置を容易に同定することが可能となる。

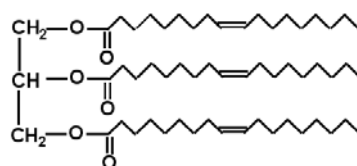


Fig.1 Structure of triolein.

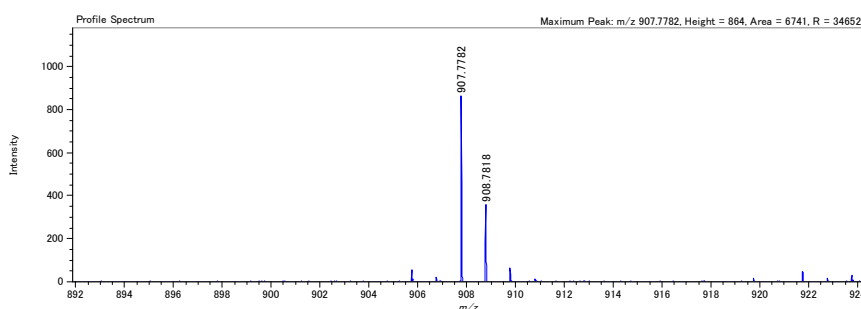


Fig.2 Mass spectrum of triolein.

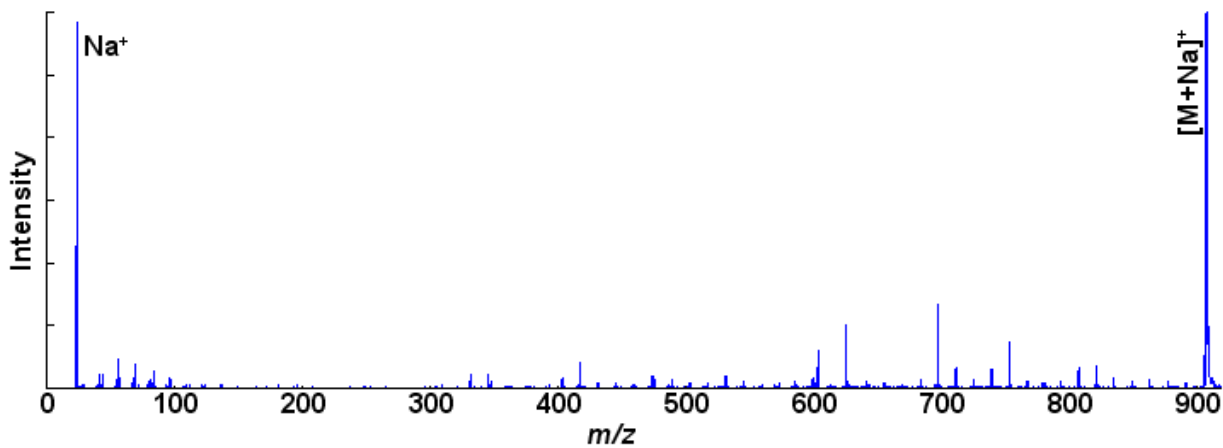


Fig.3 Product ion spectrum of sodium adducted trierein.

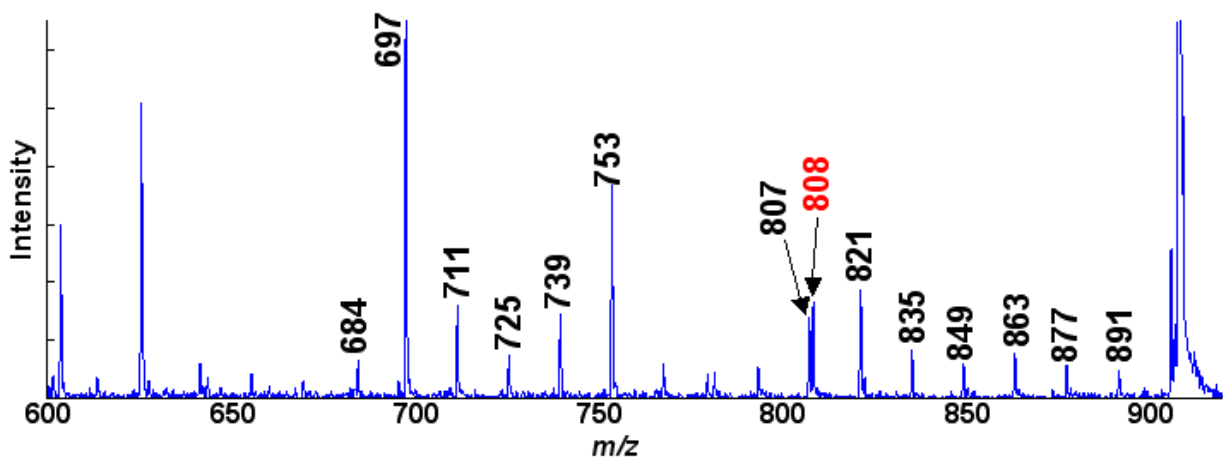


Fig.4 Product ion spectrum of sodium adducted trierein(enlarged between m/z 600 and m/z 920).

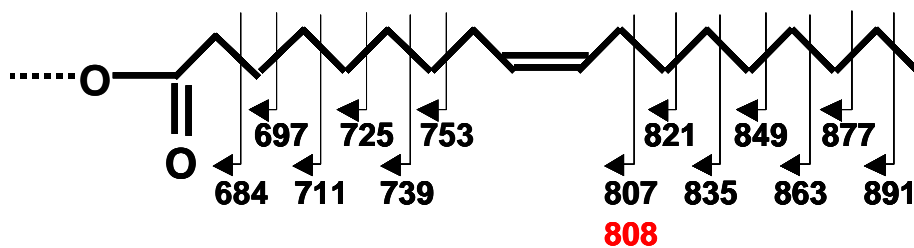


Fig.5 Peak assignment of obtained product ion spectrum.

[1] MS Tips No.178

[2] N. Akimoto, Journal of the Mass Spectrometry Society of Japan 46 (1998) 228