

JMS-S3000 Application Data

JMS-S3000“SpiralTOF” TOF-TOF オプションを用いた 側鎖の付いたリン脂質の解析例

フォスファチジルコリン (PC) は、リン脂質の一種であり脂肪酸を 2 つ持つ。末端のトリメチルアミン近傍にポジティブのチャージが固定されるために、高エネルギー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等間隔のピークが観測される[1]。今回は、PC の脂肪酸部にメチル基が 4 つ結合した 1,2-diphytanoyl-sn-glycero-3-phospho-(1'-rac-glycerol) (4ME 16:0 PC) を JMS-S3000 SpiralTOF の TOF-TOF オプションを用いて測定し、脂肪酸部のメチル基の位置を反映したプロダクトイオンスペクトルが得られるか確認した。

試料をメタノールに 100 pmol/uL の濃度で溶解させ、Spiral モードで測定を行ったところ(Fig.2), $[M+H]^+$ (モノアイソトピックイオンの m/z 856.709) 及び $[M+Na]^+$ (モノアイソトピックイオンの m/z 868.688) と推定されるピークが観測された。次に、TOF-TOF モードに切り替え、 $[M+H]^+$ のモノアイソトピックイオンをプリカーサーイオンとして選択して、プロダクトイオンスペクトルを測定した(Fig.3)。低質量域には、フォスフォコリンやグリセリンの構造を反映したピークが観測されている。 m/z 500-850 付近を拡大すると(Fig.4), Fig.1 で各ピークをアサインしているように炭素が単結合で結合している直鎖の構造を反映した 14 間隔のピークの中に、メチル基が結合している部分は 28 の間隔が観測されており、プロダクトイオンスペクトルからもここにメチル基が結合していることがわかる。

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、炭素鎖中の側鎖位置を同定することが可能となる。

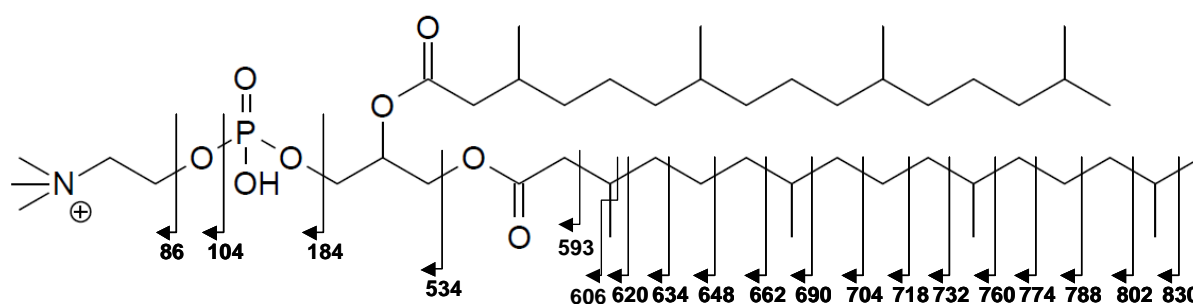


Fig.1 Structure of 4ME 16:0 PC and peak assignment of obtained product ion spectra.

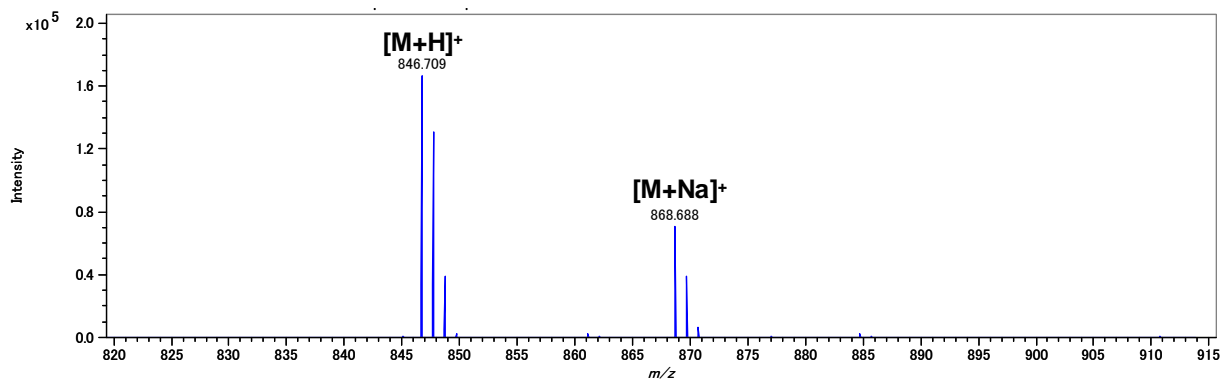


Fig.2 Mass spectrum of 4ME 16:0 PC.

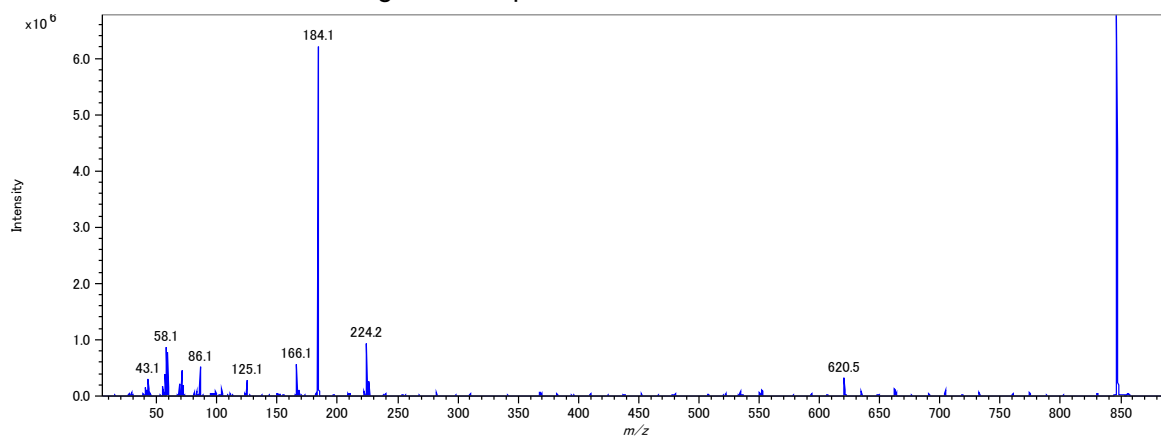


Fig.3 Product ion spectrum of 4ME 16:0 PC $[M+H]^+$.

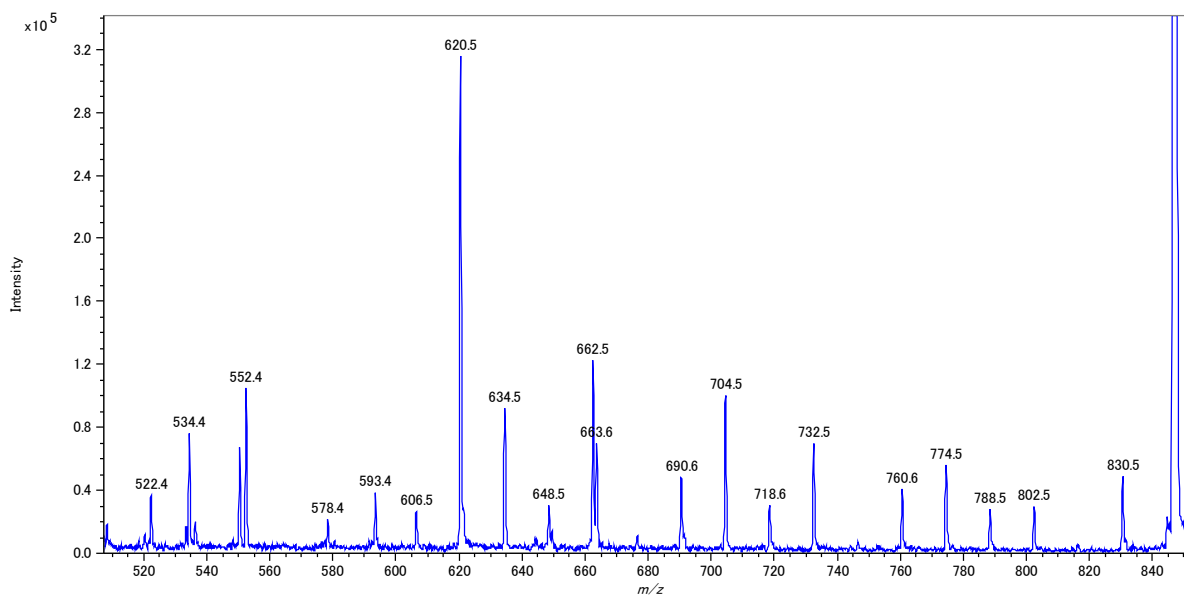


Fig.4 Product ion spectrum of 4ME 16:0 PC $[M+H]^+$ (enlarged between m/z 500 and m/z 850).

[1] MS Tips No.178 "SpiralTOF" TOF-TOF オプションを用いたトリスチアリンの解析例

[2] MS Tips No.182 "SpiralTOF" TOF-TOF オプションを用いたトリオレインの解析例