

JMS-T100LP による緑茶の分析 ～精密質量からの未知成分解析～

JMS-T100LP “AccuTOF”は、高感度、高分解能、高質量精度を有した飛行時間質量分析装置である。AccuTOFは、1本の既知イオンピークを内部標準として質量補正することによって、未知イオンピークの精密質量を求めることが可能なため、未知成分の組成推定が非常に容易である。今回は APCI イオン源を用いて、市販の緑茶中の未知成分の精密質量測定を行なった。緑茶にはカフェインだけでなく、カテキン類やアミノ酸類なども多く含まれていることが知られている。測定ではカテキン類の中で緑茶に多く含まれているエピガロカテキン(EGC)を内部標準として、未知イオンピークの精密質量を求めた。その結果から、それがお茶のうまみ成分の一つであるテアニンであることが推定できたのでその結果を紹介する。

【測定条件】

前処理	市販の緑茶を飲料用の濃度となるように抽出	———▶	フィルター (0.5 μ m ϕ)処理
質量分析計	JMS-T100LP		
LC	Agilent 1100		

<MS 条件>

イオン化法	APCI +	ニードル電圧	4000V
脱溶媒室温度	450°C	リング電圧	10V
オリフィス1温度	120°C	オリフィス1電圧	40V
飛行管電圧	7000V	オリフィス2電圧	5V
測定範囲	m/z 100~1000	検出器電圧	2500V

<LC 条件>

カラム	L-Column (化学物質評価機構製) ODS 4.6mm I.D. \times 150mm
移動相溶媒	A = 0.1% ギ酸、B = MeCN B = 0% - 100% (30min)
流量	1mL/min
注入量	5 μ L

【結果】

図 1 にトータルイオンクロマトグラムを示す。RT6.851minのマススペクトル中(図 2)には、EGCの[M+H]⁺がベースピークとして検出された。また、RT7.619minにはカフェイン、RT8.420minにはエピガロカテキンガレート(EGCg)が検出された。EGCの[M+H]⁺を内部標準として質量補正を行ない、RT2.477minのマススペクトル(図 3)の未知イオンピークの精密質量を求めた。精密質量から組成推定を行なった結果(表 1)、誤差 2.74ppmで C₇H₁₅N₂O₃ が得られ、テアニンの[M+H]⁺である可能性が高いことがわかった。

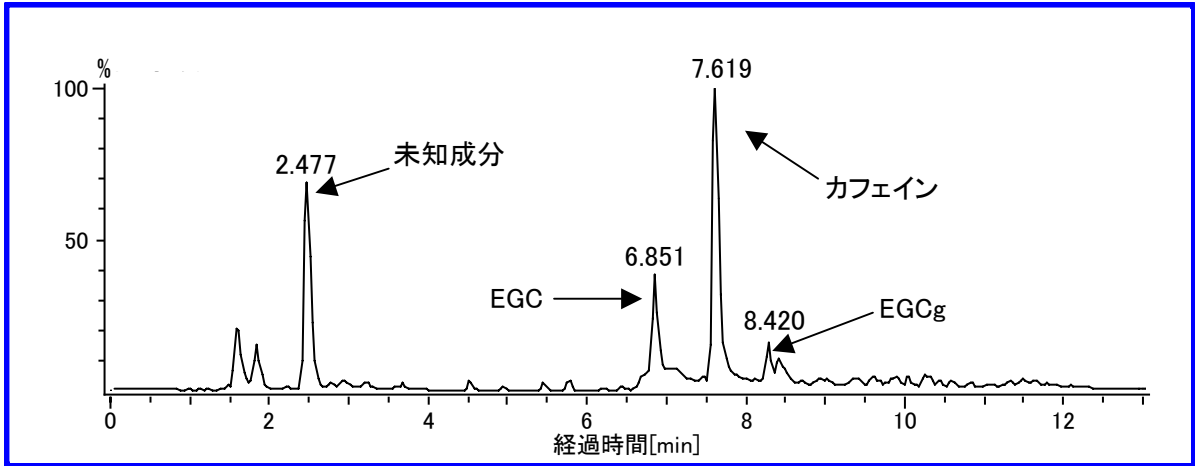


図 1 トータルイオンクロマトグラム

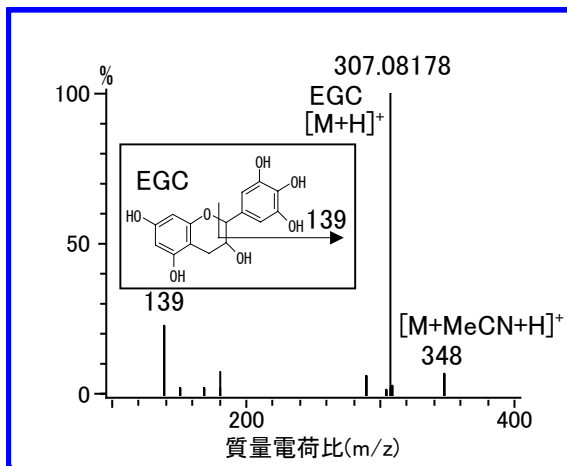


図 2 RT6.851min のマススペクトル

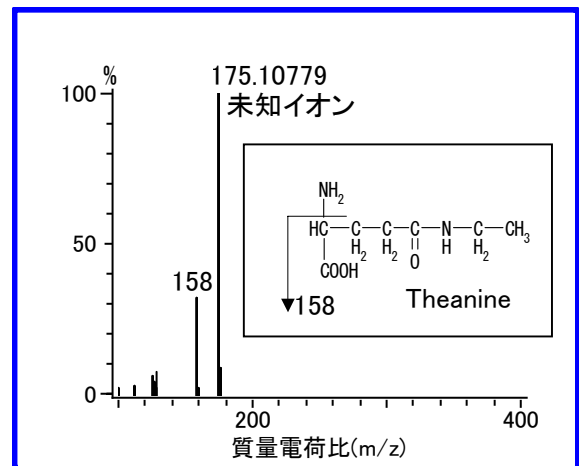


図 3 RT2.477min のマススペクトル

実測値	理論値	誤差 mmu	誤差 ppm	推定組成式	不飽和数
175.10779	175.10827	-0.48	-2.74	C ₇ H ₁₅ N ₂ O ₃	1.5

表 1 組成推定結果

【まとめ】

今回、エピガロカテキン(EGC)を内部標準として、未知イオンピークの精密質量を求め、その結果より未知成分がテアニンであると推定できた。このように AccuTOF は、1本の既知イオンピークを内部標準として用いることによって、未知イオンの精密質量が容易に得られることから、未知成分に対しての解析において非常に威力を発揮する。