

LC / MSの基礎 **～スペクトル解析を中心に～**

エムエス・ソリューションズ(株)

目次

- ◆ **LC/MSの基礎**
- ◆ **マススペクトルと質量**
- ◆ **LC/MSにおけるイオン化原理とイオン種**
- ◆ **マススペクトルの解析**
 - ◆ **付加イオンの解釈**
 - ◆ **奇数電子イオンと偶数電子イオンのフラグメンテーション解析**
- ◆ **MS/MS(プロダクトイオンスペクトル)測定例**

LC/MSとは

- ◆ 液体クロマトグラフィーと質量分析法を接続した機器分析法
- ◆ Liquid Chromatography – Mass Spectrometryの略語
- ◆ 分析手法を表す略語
- ◆ 装置を表す略語はLC-MSを推奨

液体クロマトグラフ → 質量分析計 (TOF)

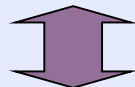


日本電子製 AccuTOF

LC/MSでできないこと

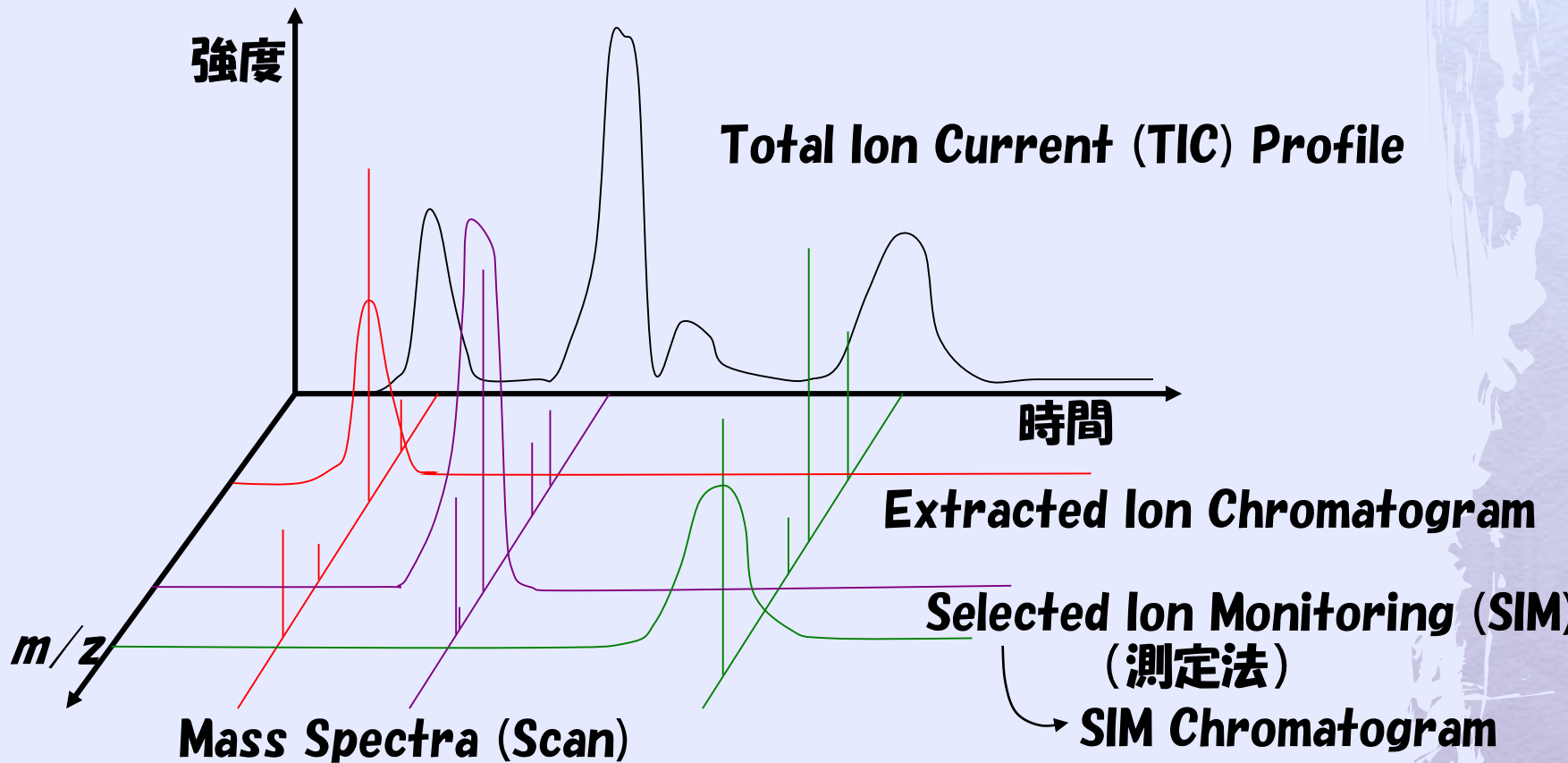
- ◆ イオン化しない物質の分析
- ◆ イオン化し難い物質の高感度分析
(イオン化し易くする方法はある(誘導体化やイオン化助剤の添加など))

MSIは高感度な分析装置



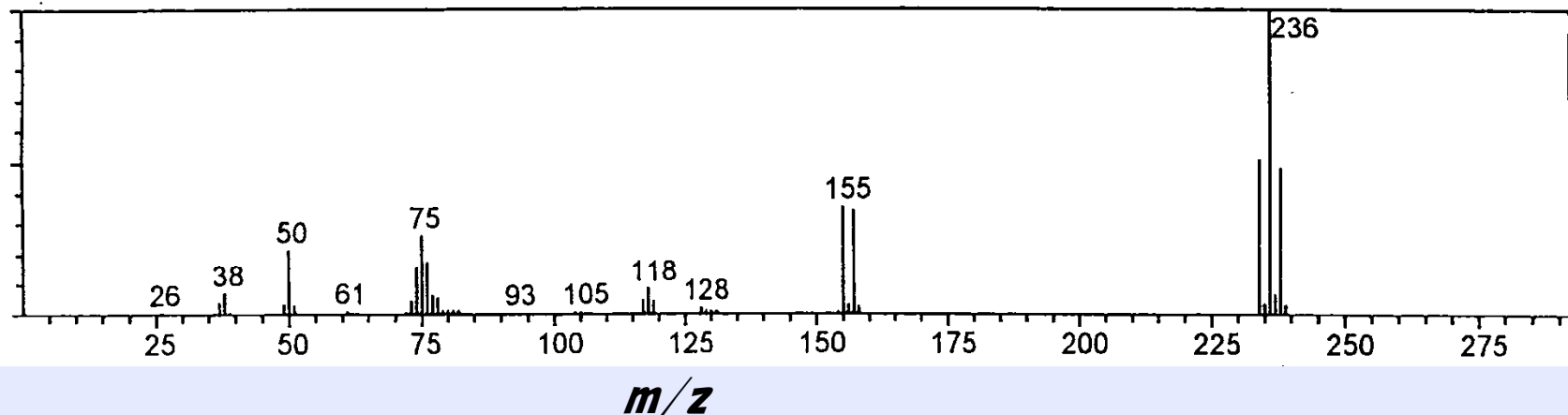
UVよりもレスポンスの低い物質は沢山ある

LC/MSで得られるデータ



マススペクトル

強度

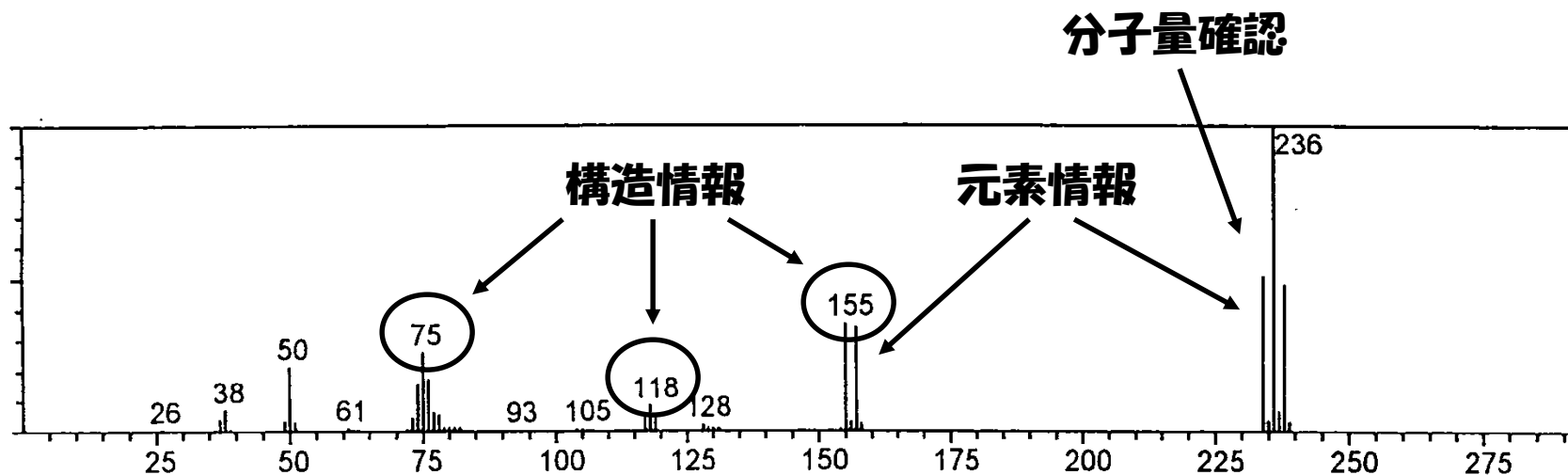


m : イオンの質量、 z : イオンの電荷数

z が1の時 $\Rightarrow m/z$ 値 = 質量 (電子の質量を無視した場合)

マススペクトルから何がわかる？

- ・ 分子量関連イオンのピークからの分子の質量 (分子量確認)
- ・ フラグメントイオンのピークから分子の構造 (構造情報)
- ・ 同位体イオンピークの高さから構成元素の種類と数 (元素情報)
精密質量からイオン組成式



注) LC/MSでは、通常フラグメントイオンは観測されない