

# 質量分析の基礎 – 理論

**BUILDING**  
BETTER SCIENCE

AGILENT AND YOU



アジレントは教育機関の活動をサポートし、当社が所有する資料の使用機会を積極的に提供しています。

---

本スライドセットはアジレントによって制作されています。使用目的は教育目的のみに限定されています。

画像、略図、図をその他の目的に使用する場合は、事前にアジレントまでお問い合わせください。



# はじめに

**質量分析法 (MS)** は、ガス相イオンの質量電荷比とアバンダンスを測定することによって、サンプル内に存在する化学物質の量と種類を特定するために役立つ化学分析技法です。

質量スペクトルとは、イオンシグナルを質量電荷比の関数としてプロットしたものです。スペクトルから得られる分子イオンとフラグメントの質量を用いて、化合物の元素組成または同位体特性を決定します。また、この情報をもとに、農薬やペプチドなどの分子の化学構造を解明します。

質量分析法では、化学物質をイオン化して荷電分子または分子フラグメントを発生させ、その質量電荷比を測定します。

出典: Wikipedia

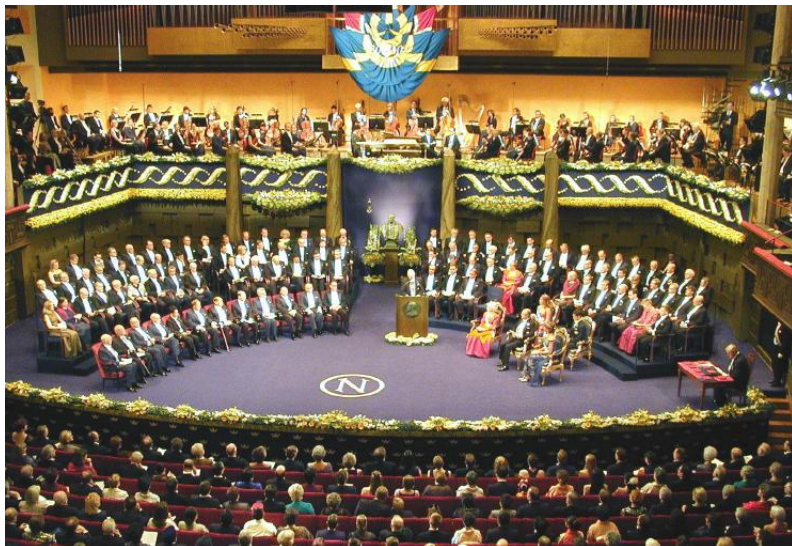


# はじめに

## ノーベル賞受賞の技術

John Fenn 氏および田中耕一氏は、2 種類のソフトイオン化技術の開発により、2002 年にノーベル化学賞を受賞しました。

- エレクトロスプレー技術、Fenn 博士
- ソフトレーザー脱離法、田中博士



ストックホルムコンサートホール、スウェーデン、2002 年 12 月



スウェーデン国王からノーベル賞を受け取る Fenn 博士

# 目次

## はじめに

- [基本的な考慮事項](#)
- [質量分析法における質量](#)
- [基本的なステップ](#)

## 動作の仕組み

- [イオン化](#)
  - [電子衝撃](#)
  - [化学イオン化](#)
  - [サンプルの考慮事項 \(LC-MS\)](#)
  - [エレクトロスプレー](#)
  - [大気圧化学イオン化](#)
  - [大気圧光イオン化](#)
  - [マルチモードイオン化](#)
  - [MALDI](#)
  - [ICP](#)

## 動作の仕組み

- [マスアナライザ](#)
  - [シングル四重極](#)
  - [トリプル四重極](#)
  - [イオントラップ](#)
  - [飛行時間型](#)

## 結果

- [質量スペクトル](#)
- [シングル四重極と TOF](#)
- [多価イオンおよびデコンボリューション](#)

## 詳細情報

- [アジレントのアカデミア Web ページ](#)
- [文献](#)





# 初めに

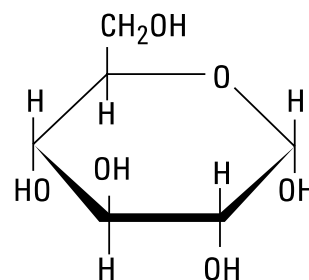
## 基本的な考慮事項

元素は、その質量によって一意的に同定することができます。質量分析法は、分子量または原子量を測定するための分析メソッドです。

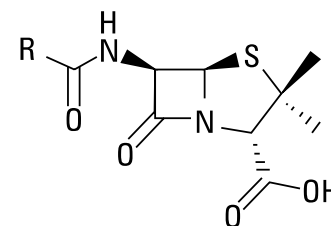
Figure 1: Periodic Table of Elements. The table displays elements from Hydrogen (H) to Oganesson (Og). Elements are color-coded by groups: Alkali metals (blue), Alkali earth metals (orange), Transition metals (green), Metals (purple), Metalloids (brown), Nonmetals (pink), Halogens (red), Noble gases (grey), Lanthanides (light blue), and Actinides (light orange). The table includes element symbols, atomic numbers, and names. The legend at the bottom indicates the color coding for different groups of elements.

出典: 周期表、[ポスター SI-0186](#)

化合物は、さまざまな元素で構成されていますが、質量によって識別できます。



グルコース C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub>  
MW: 180,1559 g/mol



ペニシリン C<sub>16</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>S  
MW: 334,39 g/mol

# はじめに 質量分析法における質量

分子の平均質量は、構成元素の平均原子質量を合計することによって求めます。

水 (H<sub>2</sub>O) の平均質量:  $1.00794 + 1.00794 + 15.9994 = 18.01528$  Da

**モノアイソトピック質量**とは、同位体の平均質量の代わりに、各元素の主（最も存在量の多い）同位体の未結合の基底状態の静止質量を使用した、分子内の原子の質量の合計です。モノアイソトピック質量は、一般に統一原子質量単位で表します。

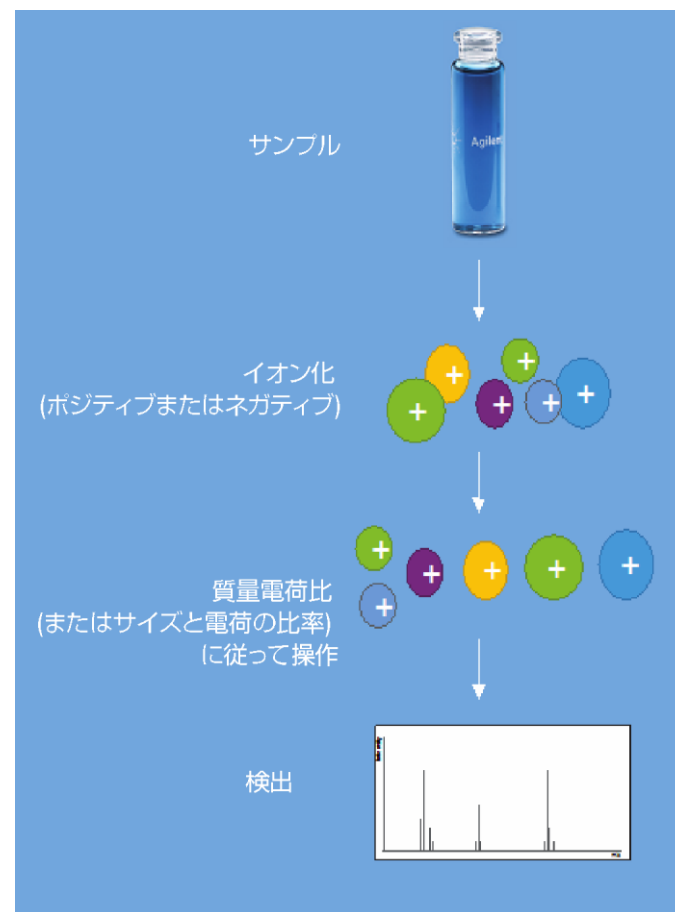
**精密質量**（より適切には「測定された精密質量」）は、実験的に測定された質量であり、これにより元素組成を確定できます。質量が 200 u を下回る分子の場合、元素組成を一意的に確定するためには多くの場合 5 ppm の精度で十分です。

# はじめに

## 基本的なステップ

### 標準的な MS 手順

- サンプル (固体、液体、気体) がイオン化されます。
- サンプルの分子は、イオン化中に壊れて荷電フラグメントになることがあります。
- イオンは、質量電荷比 ( $m/z$ ) に従って分離されます。
- イオンは、荷電粒子 (例えば電子マルチプライア) を検出可能なメカニズムによって検出されます。
- 結果は、 $m/z$  比の関数としての、相対アバundランスのスペクトルとして表示されます。
- 既知の質量を同定された質量と相関させることによって、または特徴的なフラグメンテーションパターンを通じて、同定を実行します。





# 動作の仕組み イオン化

サンプルを質量分析するためには、イオン源でイオン化する必要があります。

## 気体サンプル導入

- 電子イオン化 (EI)
- 化学イオン化 (CI)

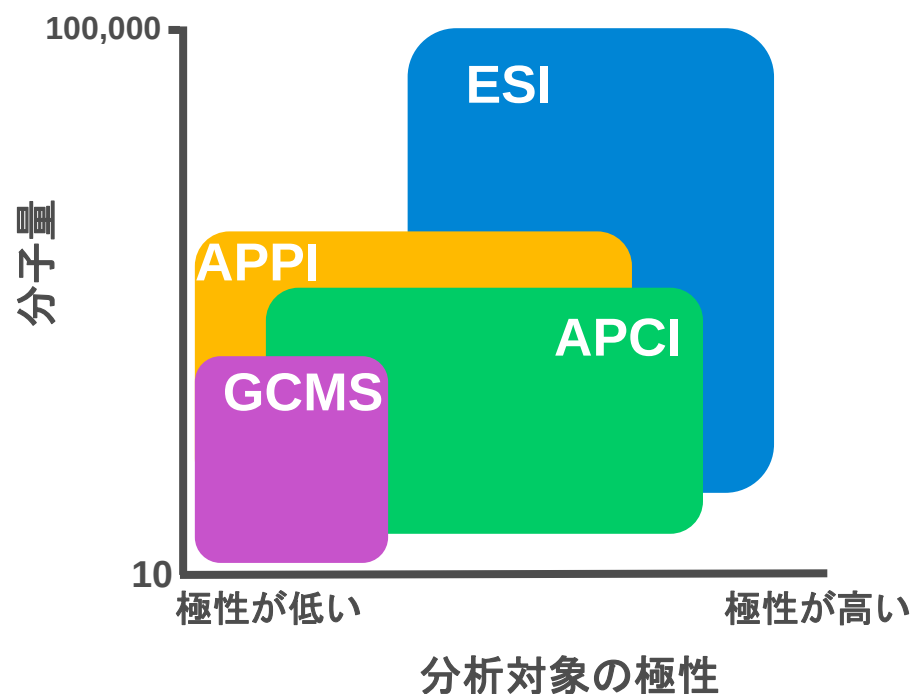
## 液体サンプル導入

- エレクトロスプレーイオン化 (ESI)
- 大気圧化学イオン化 (APCI)
- 大気圧光イオン化 (APPI)
- マルチモードイオン化 (MMI)
- マトリックス支援レーザー脱離イオン化 (MALDI)
- 誘導結合プラズマ (ICP)



# 動作の仕組み イオン化

分析対象の極性によってイオン源が決まります



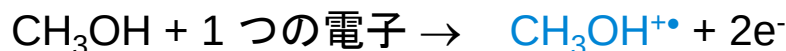
|       |                       |
|-------|-----------------------|
| ESI   | エレクトロスプレーイオン化         |
| APPI  | 大気圧光イオン化              |
| APCI  | 大気圧化学イオン化             |
| GC/MS | ガスクロマトグラフィー/<br>質量分析法 |

# 動作の仕組み

## イオン化 – 電子衝撃 (EI)

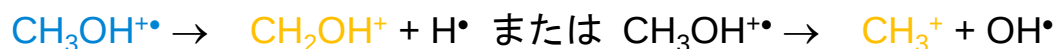
電子衝撃 (EI) は、十分に確立されており、ガスクロマトグラフィー (GC) において最も広く使用されているイオン化手法です。

ガスクロマトグラフを出た分子に、電子ビーム (70 eV) が衝突し、それによって分子から電子が除去され、荷電イオンになります。



分子イオン

EI によって、一価分子イオンとフラグメントイオン (元の分子のうちの小さい一部分) が生成されます。これらは構造の解明に使用されます。



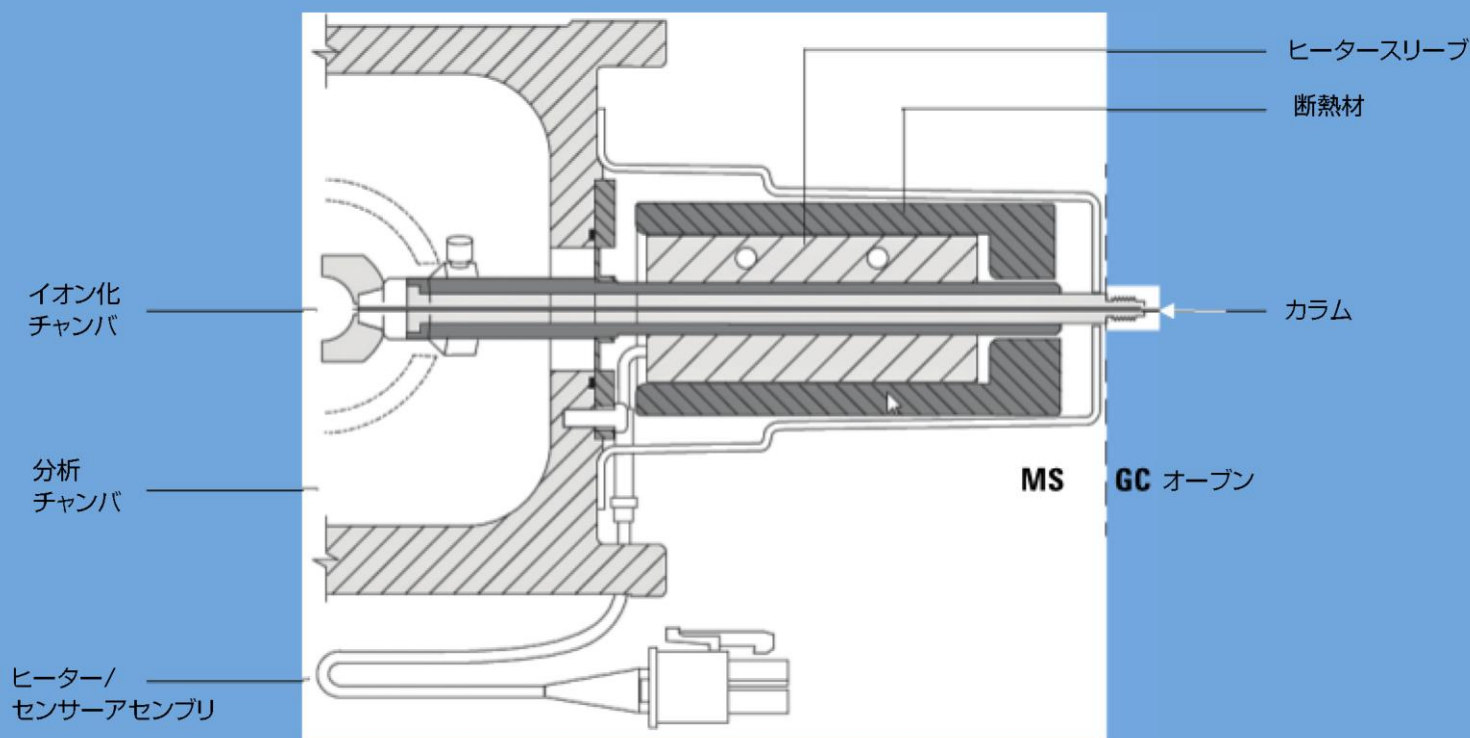
フラグメントイオン

電子または光電子増倍管が、分離されたイオンを検出します。  
生成された質量スペクトルでは、所定の  $m/z$  比でシグナル強度をプロットします。

# 動作の仕組み

## イオン化 – 電子衝撃 (EI)

GC/MS インタフェースは、高温で動作します。



カラムの端はイオン化チャンバに 1~2 mm 突き出ています。

# 動作の仕組み

## イオン化 – 化学イオン化 (CI)

EI は、電子運動エネルギーを分析対象分子に直接入れる直接エネルギー転移プロセスです。

CI は、中間化学物質が関わる間接のプロセスです。これは、特に正化学イオン化 (PCI) において当てはまります。PCI では、イオン源は、分析対象と反応する試薬イオンを作成するためにイオン化された試薬ガスで満たされます。

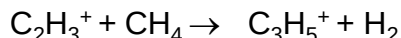
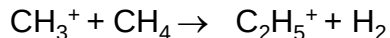
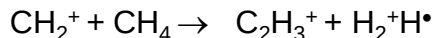
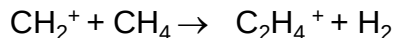
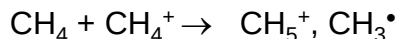
最も使用頻度の高い試薬ガス: **メタン**、**イソブタン**、および**アンモニア**。

適用された試薬ガスによって、分析対象のイオン化とフラグメンテーションの動作が決まります。

主なメタン反応は以下のとおりです。



試薬ガスは、イオン源に入射した電子によってイオン化されます。



# 動作の仕組み

## イオン化 – サンプルの考慮事項 (LC/MS)

ESI



☐ 揮発性である必要はない

☐ 熱的に不安定な分析対象物に適した技法

☐ 溶液中でイオンを形成

☐ 多価イオンを形成する可能性がある

APCI



☐ ある程度の揮発性が必要

☐ 分析対象物は熱安定性が高くなければならない

☐ ガス相中でイオンを形成

☐ 一価イオンのみを形成

APPI



☐ ある程度の揮発性が必要

☐ 分析対象物は熱安定性が高くなければならない

☐ ガス相中でイオンを形成

☐ 一価イオンのみを形成

多くの成分は、これらの3種類のイオン源で良好にイオン化します。  
APCI/APPIでは、非極性のためESIではイオン化できない分子もイオン化可能です。





# 動作の仕組み

## イオン化 – サンプルの考慮事項 (LC/MS)

### ESI



- ☐ 溶液内のイオン 例:  
カテコールアミン、  
硫酸抱合体、4 級アミン
- ☐ ヘテロ原子を含む化合物 例:  
カーバメート、  
ベンゾジアゼピン
- ☐ 溶液内の電荷を増やす化合物  
例: タンパク質、ペプチド、  
オリゴヌクレオチド

### APCI



- ☐ MW および極性が中程度の化  
合物 例: PAH、PCB、脂肪酸、  
フタレート、アルコール
- ☐ ヘテロ原子を含む化合物 例:  
カーバメート、  
ベンゾジアゼピン
- ☐ 極性が低すぎるため ESI が  
反応できない化合物

### APPI



- ☐ 中程度の MW で、中極性から  
低極性である化合物 例: PAH、  
PCB、脂肪酸、フタレート、  
アルコール
- ☐ ヘテロ原子を含む化合物 例:  
カーバメート、  
ベンゾジアゼピン
- ☐ 極性が低すぎるため ESI が  
反応できない化合物

# 動作の仕組み

## イオン化 – エレクトロスプレー (ESI)

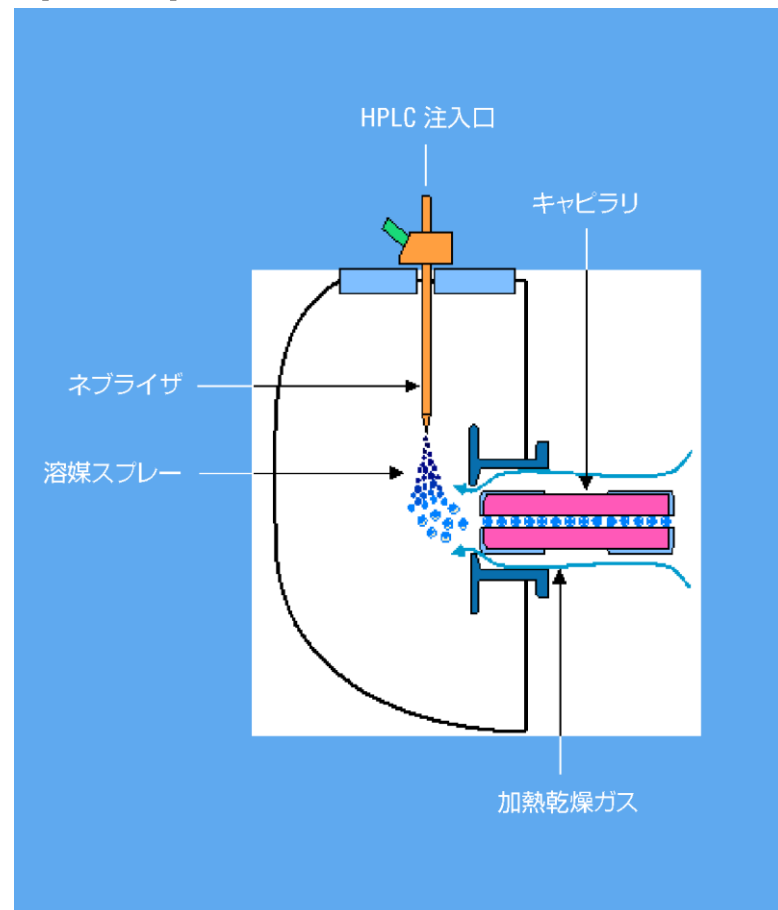
エレクトロスプレーイオン化 (ESI) は、ソフトイオン化技法です。

LC 溶媒を、強い静電場と加熱乾燥ガスが存在する大気圧のスプレーチャンバにスプレー (噴霧) します。静電場は、ネブライザ (図の設計では下向き) と、高電圧を印加したキャピラリとの間に発生します。

この手法が適している分子

- 低分子 (グルコース) および大型の生体分子 (タンパク質、オリゴヌクレオチド)

ESI で多重荷電と呼ばれる現象が起こり、これによって大型分子の分析が可能になります (-> [デコンボリューション](#))。



エレクトロスプレーイオンソース  
出典: [LC/MS コンセプトガイド](#), (p.22)

# 動作の仕組み

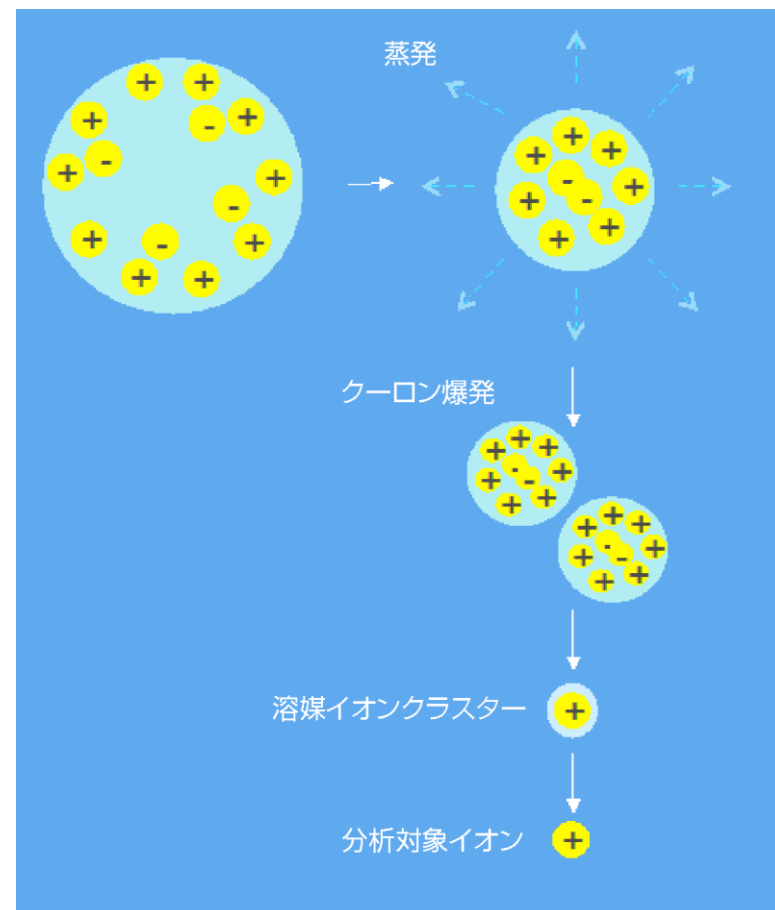
## イオン化 – ESI プロセス

### 帯電液滴から分析対象イオンまで

ネブライザは一樣なサイズの液滴を発生させます。帯電液滴は、誘電キャピラリに引き付けられます。キャピラリの周囲の加熱された窒素ストリームによって、液滴は縮小します。この処理を脱溶媒和と呼びます。

反発する静電気力 (クーロン力) が液滴の凝集力を超えたために液滴が破裂するまで、液滴は縮小し続けます。

このプロセスは、分析対象イオンが最終的にガス相に脱着されるまで繰り返されます。微小液滴の表面の強電場によって駆動されます。このプロセスは、**イオン蒸発**と呼ばれます。



# 動作の仕組み

## イオン化 – 大気圧化学イオン化 (APCI)

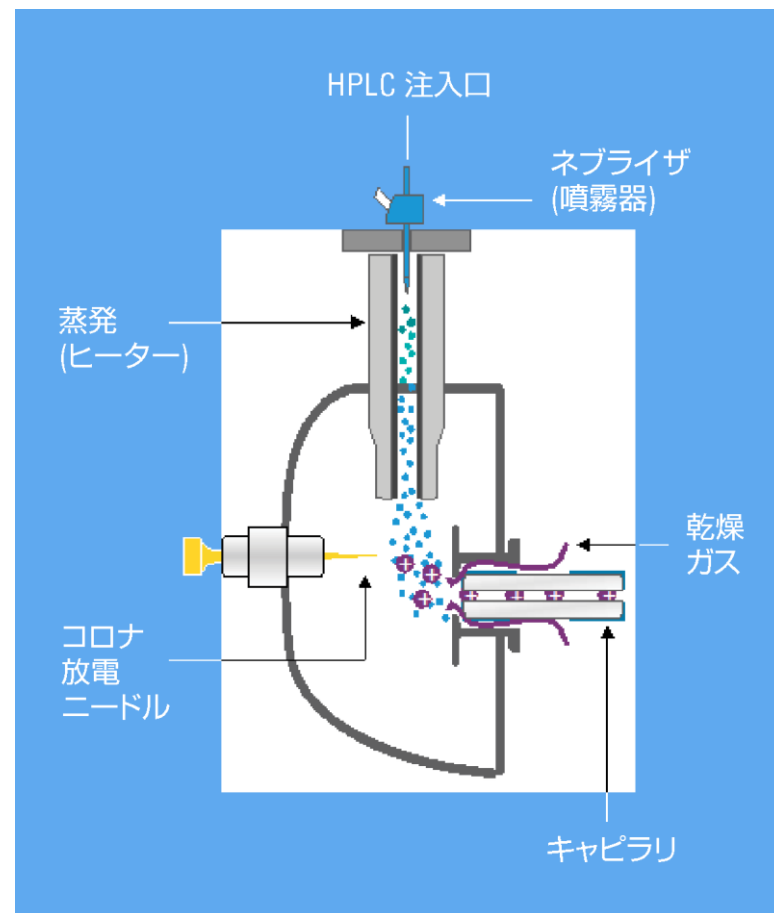
APCI は、ガス相の化学イオン化プロセスです。  
そのため、分析対象が、イオン化のためにガス相の中に存在する必要があります。

LC 溶媒は噴霧ニードルを通過します。このニードルは微細なスプレー粒子を生成します。

液滴は、加熱されたセラミックチューブ (400~500 °C まで) で完全に蒸発します。

この手法が適している分子

- 分子 < 1,500 u
- 低極性化合物および無極性化合物 (通常は順相クロマトグラフィーによって分析される)



電気化学イオン化イオンソース

出典: [LC/MS コンセプトガイド](#) (p.27)

# 動作の仕組み

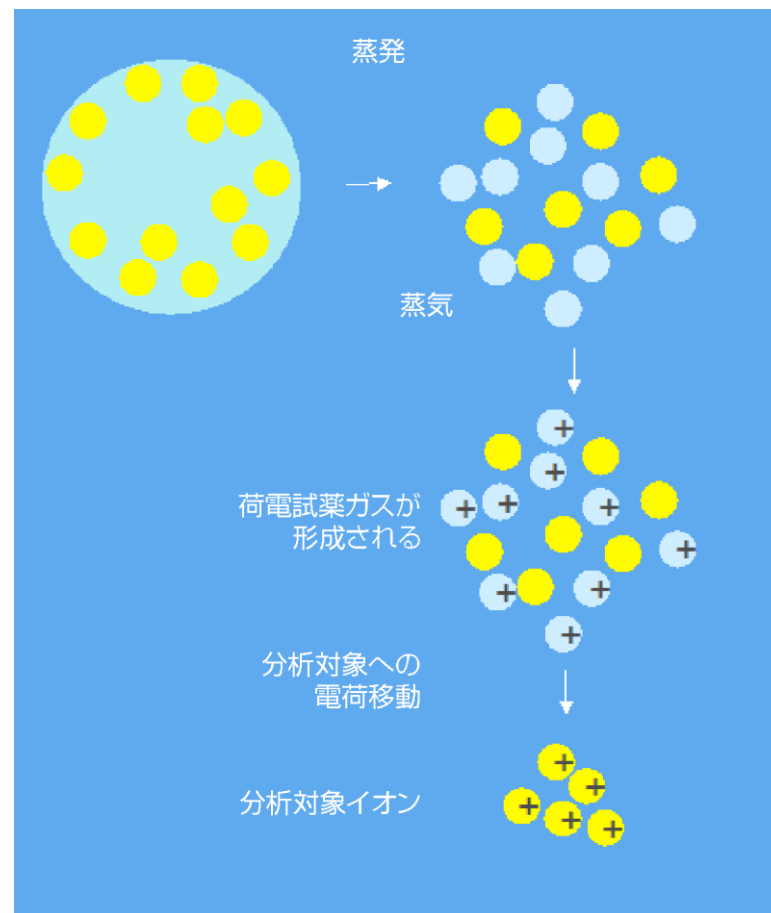
## イオン化 – APCI プロセス

ここでは、APCI の蒸発プロセスとイオン化プロセスを示します。

蒸発するまで、および試薬ガスがイオン化されるまで、分析対象成分がイオン化されないことに注意してください。

試薬ガスは、次に電荷を分析対象に送ります。

一般に APCI は一価イオンのみを生成しますが、電荷の部位が離れた状態 (通常、疎水性領域による) の二価イオンを取得することが可能です。



# 動作の仕組み

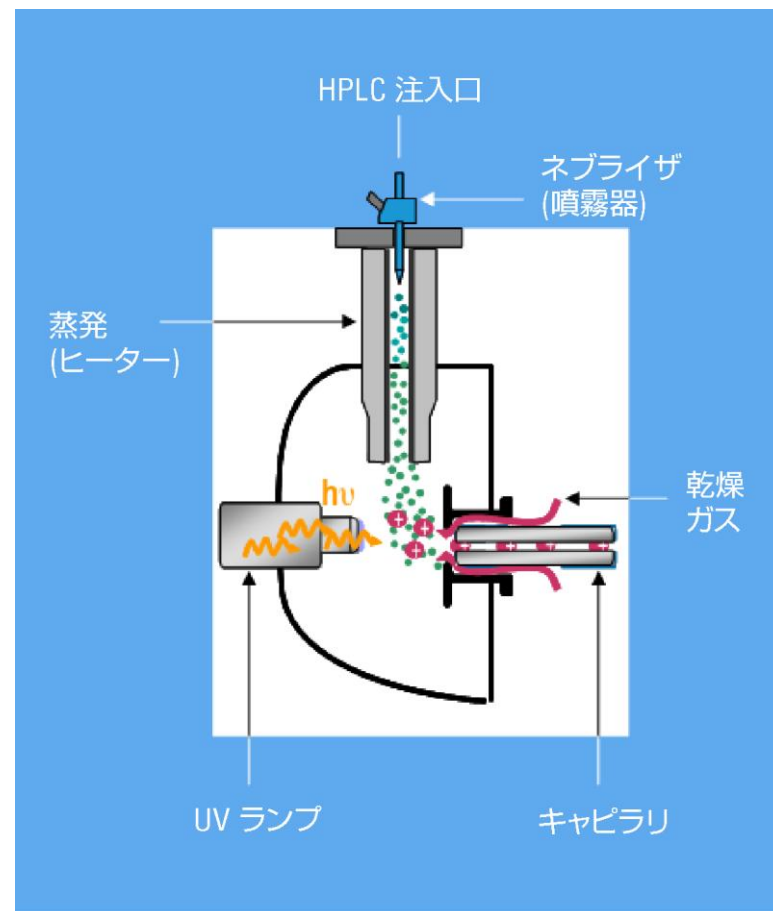
## イオン化 – 大気圧光イオン化 (APPI)

APPI 技法を使用する場合、LC 溶媒は噴霧ニードルを通過して微細なスプレー粒子になります。

液滴は、加熱されたセラミックチューブで完全に蒸発します。

ガスと蒸気の混合物が、クリプトンランプの紫外線を通して、サンプル分子をイオン化します。サンプルイオンは、次にキャピラリーに導入されます。

通常は APCI によって分析される化合物の多くに対して、APPI を適用できます。APPI は、非極性芳香族化合物の分析で特に有用であることが分かっています。



大気圧光イオン化イオンソース

出典: [LC/MS コンセプトガイド](#) (p.29)

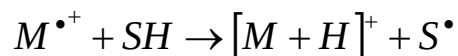
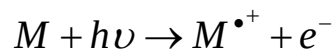
# 動作の仕組み

## イオン化 – APPI プロセス

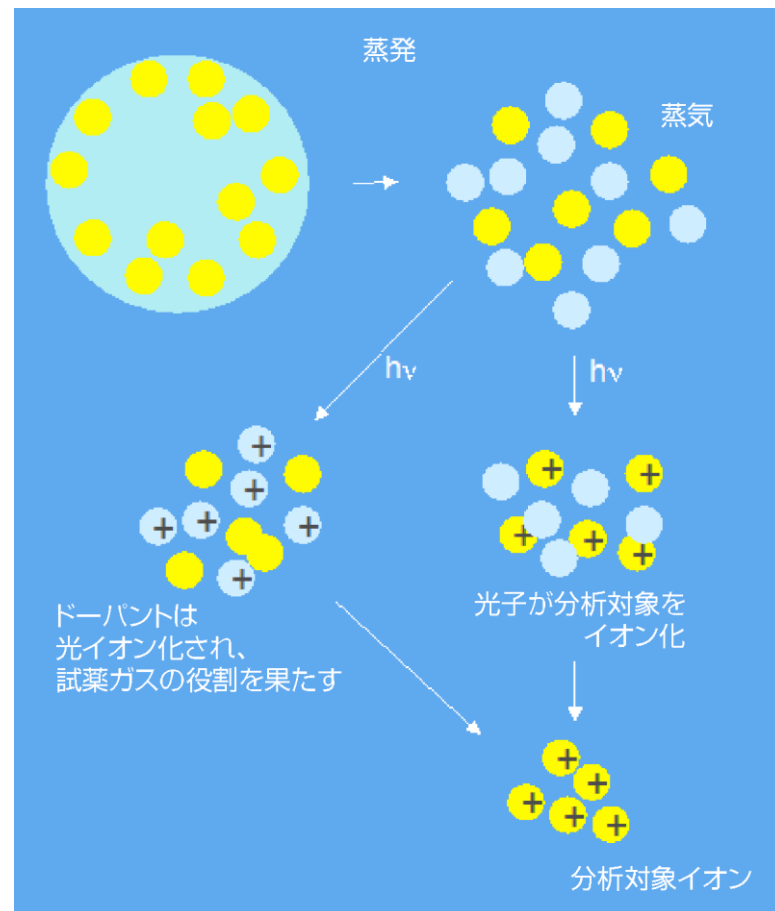
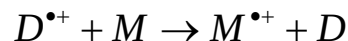
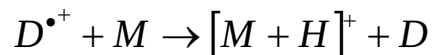
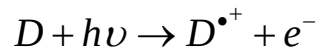
ここでは、光イオン化の蒸発プロセスとイオン化プロセスを示します。

APPI と APCI は類似していますが、APPI では、イオン化でコロナニードルの代わりにランプを使用します。APPI は、多くの場合、追加の溶媒または移動相溶媒（「ドーパント」 (D) と呼ばれる）も使用して、光イオン化プロセスを支援します。

### 直接 APPI



### ドーパント APPI





# 動作の仕組み

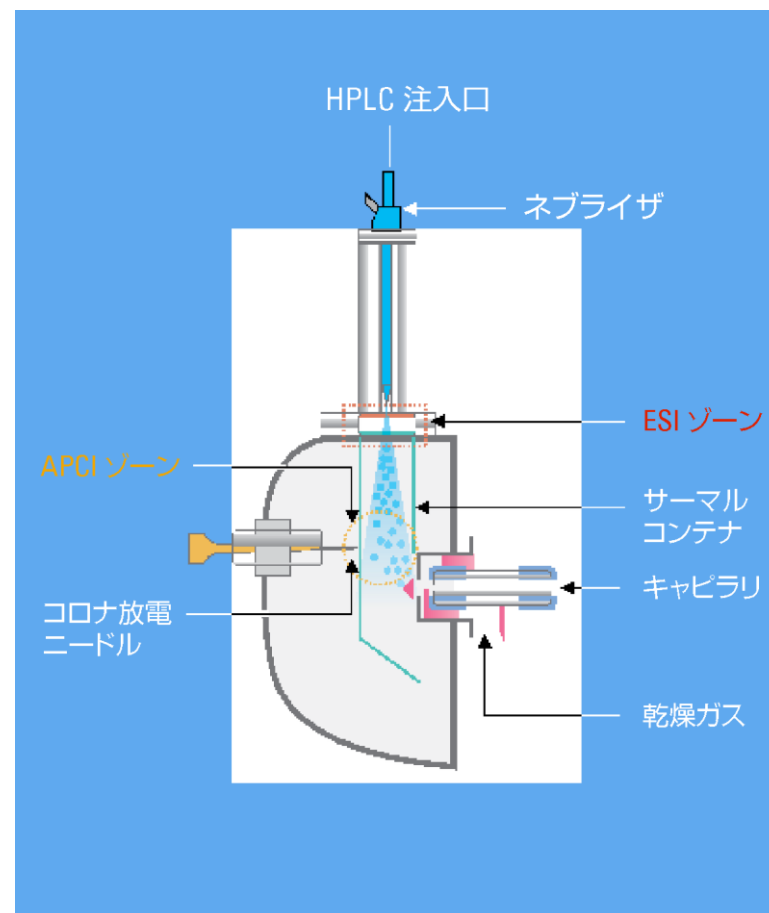
## イオン化 – マルチモードイオン化 (MMI)

マルチモードイオン源は、3つの異なるモードで動作できるイオン源です。

- APCI
- ESI
- 同時の APCI/ESI

これには、2つの電氣的に分離された最適化ゾーンが組み込まれています。1つは ESI 用、もう1つは APCI 用です。同時に APCI/ESI を実施中に、両方のイオン化モードからのイオンがキャピラリーに入り、質量分析計によって同時に分析されます。

MMI は、未知化合物のスクリーニングに役立ちます。あるいはサンプルに化合物が混在して含まれている（一部は ESI が対応し、一部は APCI が対応する）場合はいつでも役立ちます。



マルチモードイオンソース

出典: [LC/MS コンセプトガイド](#) (p.30)

# 動作の仕組み

## イオン化 – マトリックス支援レーザー脱離イオン化法 (MALDI)

マトリックス支援レーザー脱離イオン化法 (MALDI) は、ソフトイオン化技法です。

サンプルはマトリックスと混合され、金属板に適用されます。

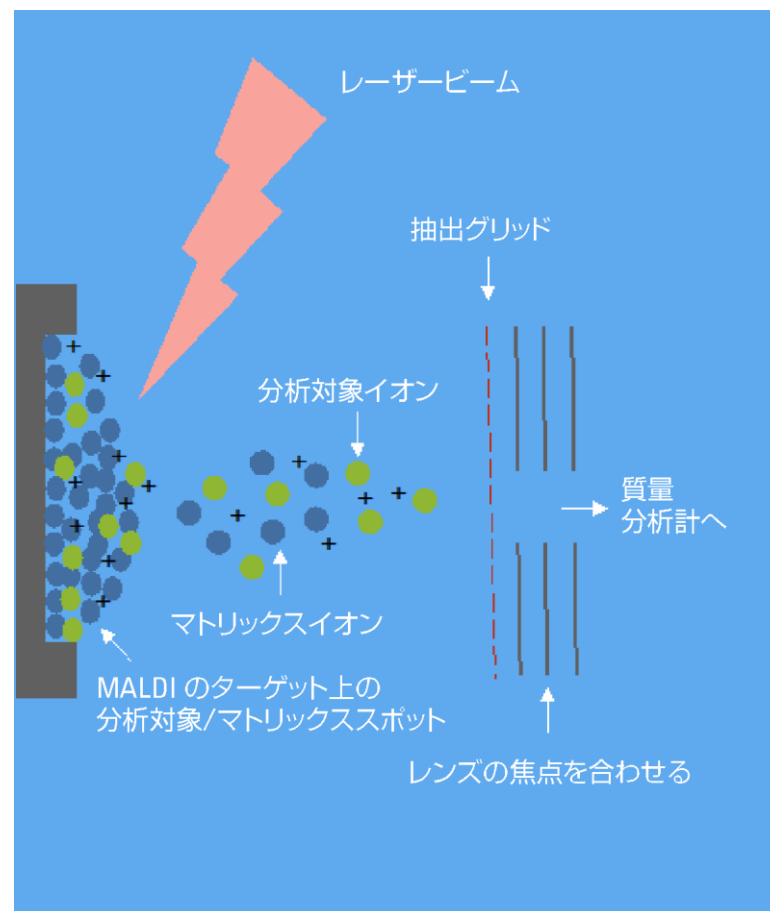
パルスレーザーはサンプルを照射し、アブレーションと脱着をトリガーします。

分析対象分子は、アブレーションされたガスのホットプルームでイオン化されます。

イオンは加速されて質量分析計に入ります。

この手法が適している分子

- 生体分子 (DNA、タンパク質、糖)
- 大型の有機分子 (ポリマー)



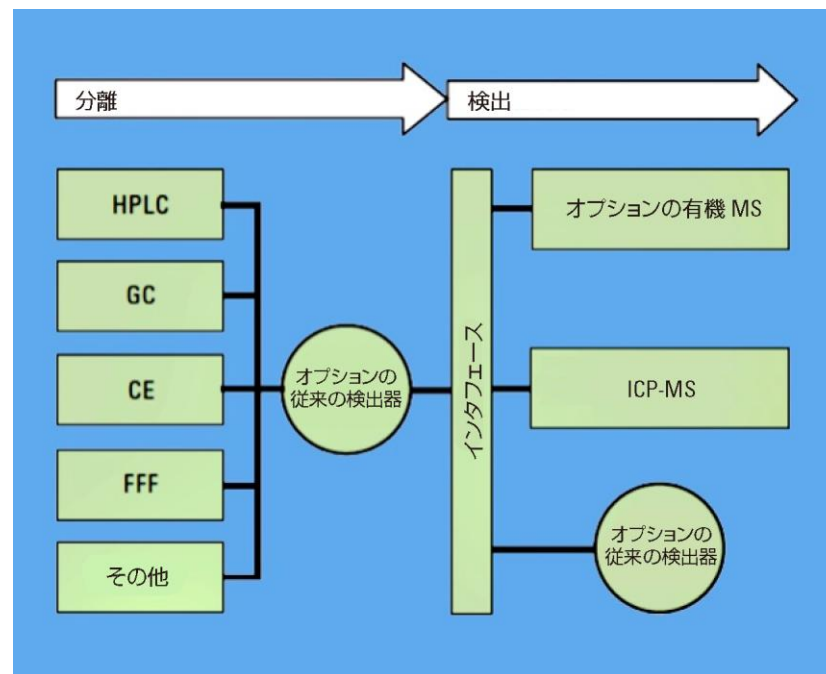
# 動作の仕組み

## イオン化 – 誘導結合プラズマ (ICP)

誘導結合プラズマ (ICP) 機器は、電磁誘導 (すなわち時間的に変化する磁場) が発生させた電流によってエネルギーが供給されるプラズマ源を使用します。プラズマは非常にエネルギーに富んでいるため、分子を破壊して、イオン化された元素にします。

さまざまなタイプの ICP 構造が提供されており、それらをさまざまな技術と結合できます。

- ICP-AES 原子発光分光分析
- ICP-OES 光学発光分光分析
- ICP-MS 質量分析法
- ICP-RIE 反応性イオンエッチング



ICP-MS システムと接続された各種コンポーネントの相互関係を示す概略図

# 動作の仕組み

## マスアナライザ

イオン化およびイオンの移動後に、分析対象はマスアナライザに入ります。質量分析計は質量スペクトルでイオン信号を測定します。これで、化合物の分子量、構造、同定、および定量に関する有用な情報を提供できます。

さまざまなタイプのマスアナライザがあります。

- シングル四重極 (SQ)
- トリプル四重極 (QQQ)
- 飛行時間型 (TOF)
- イオントラップ (IT)

# 動作の仕組み

## マスアナライザー – シングル四重極 (SQ)

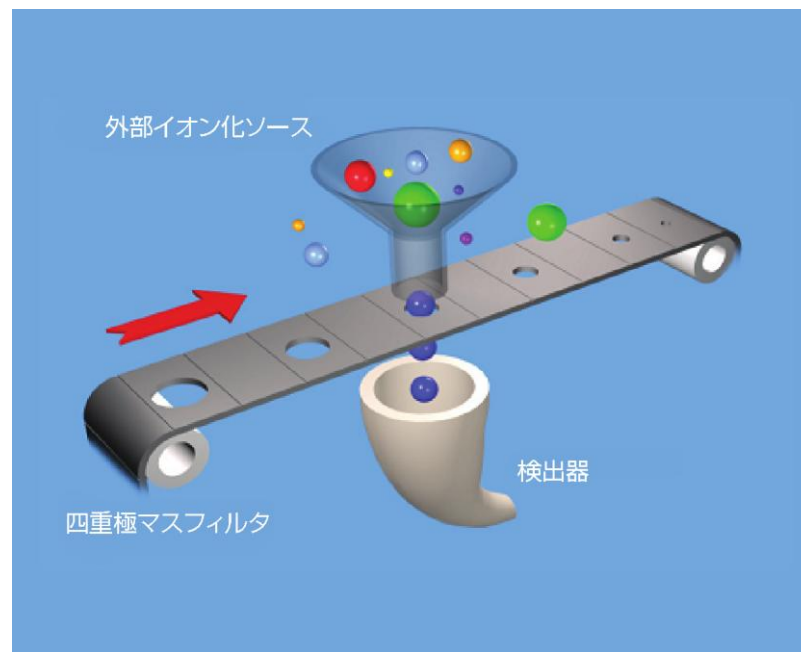
イオン源で生成された荷電イオンがマスアナライザーに入ります。

四重極マスアナライザーは順次スキャンされ、一度に単一のイオン  $m/z$  のみが渡されるようになっています。他のすべてのイオンは失われます。

**$m/z$  - 質量電荷比:**

イオンの質量 (ダルトンまたは  $u$ ) をイオンの電荷の数で除算した値

受け取る情報: **MS のみ**

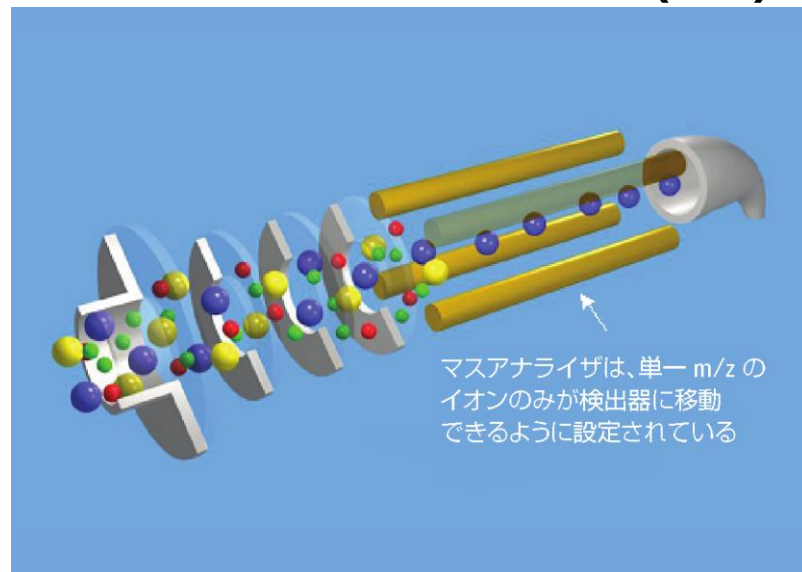


概念モデル – シングル四重極

# 動作の仕組み

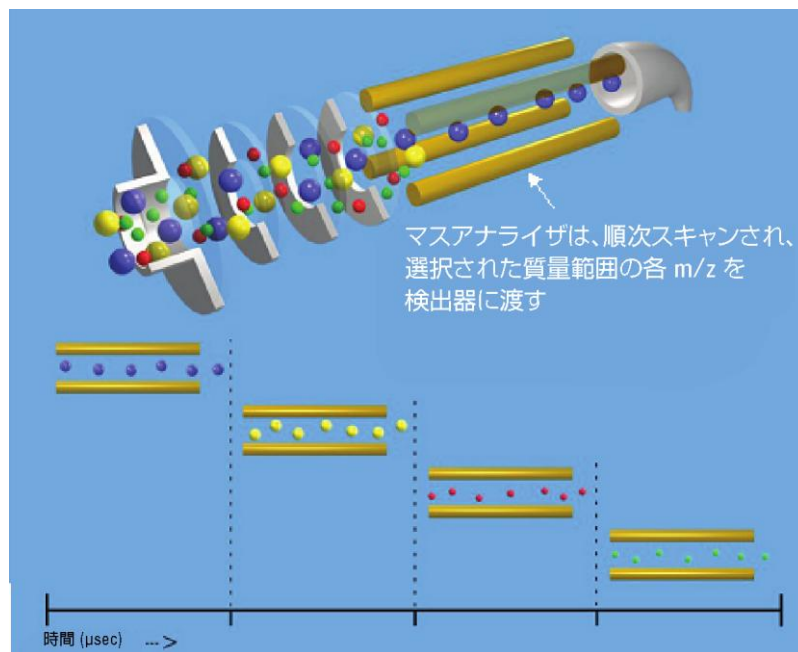
## マスアナライザー – シングル四重極 (SQ)

### シングルイオンモニタリング (SIM)



特定の  $m/z$  の対象イオンのみがモニタリングされます。シングル四重極での SIM では、定量のために非常に高い感度を実現できますが、特異性には欠けています。

### スキャンモード



スキャン MS モードでは、四重極マスアナライザは順次スキャンされ、一度に 1 つの  $m/z$  のみを検出器に渡すようになっています。

# 動作の仕組み

## マスアナライザー トリプル四重極 (QQQ)

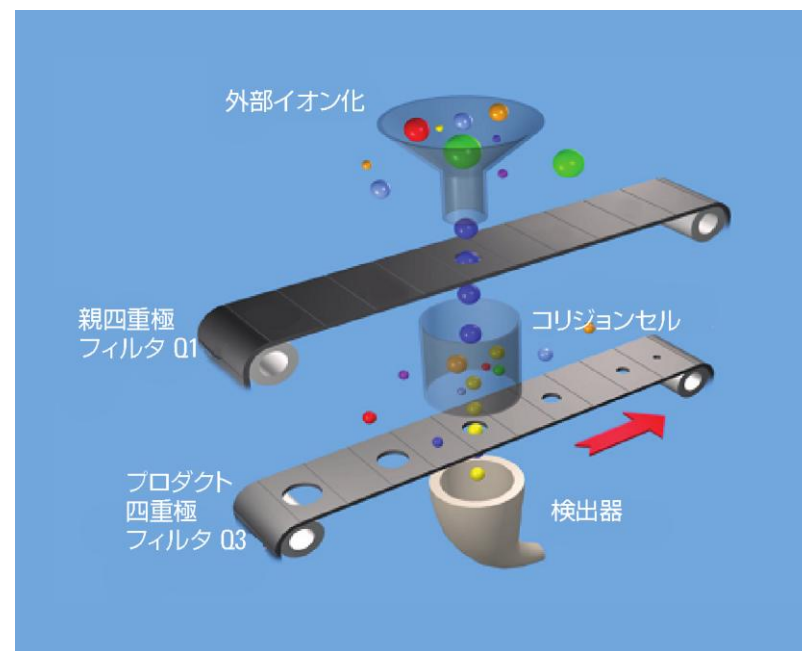
イオン源で生成された荷電イオンがマスアナライザに入ります。

アナライザは、3つの四重極 (Q1~Q3) から構成されているため、複数のモードの操作で得られる情報が異なります。

一般的なセットは以下のとおりです。

- Q1: 特定の  $m/z$  (プリカーサイオン) のフィルタとして使用される
- Q2: プリカーサイオンを断片化し、プロダクトイオンを生成するために、コリジョンセルとして使用される
- Q3: 特定の  $m/z$  (SRMまたはMRM) またはスキャンモード (プロダクトイオンスキャン) に設定される

受け取る情報: MS および MS/MS



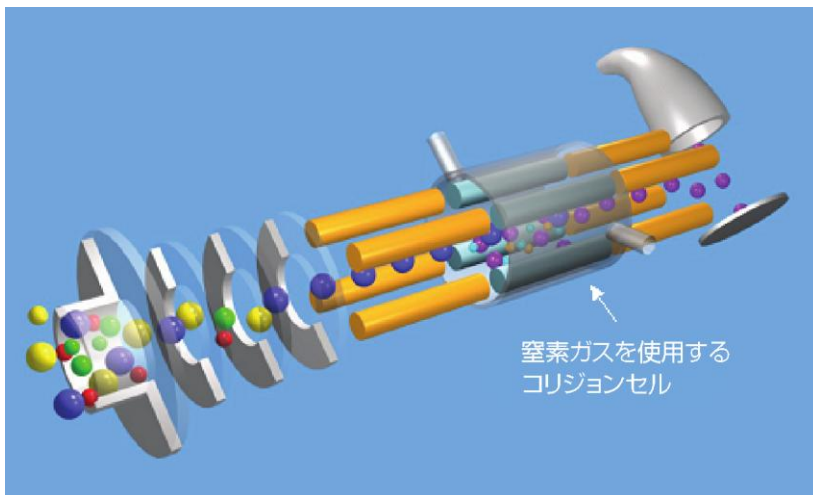
概念モデル トリプル四重極  
SRM モードを示した図



# 動作の仕組み

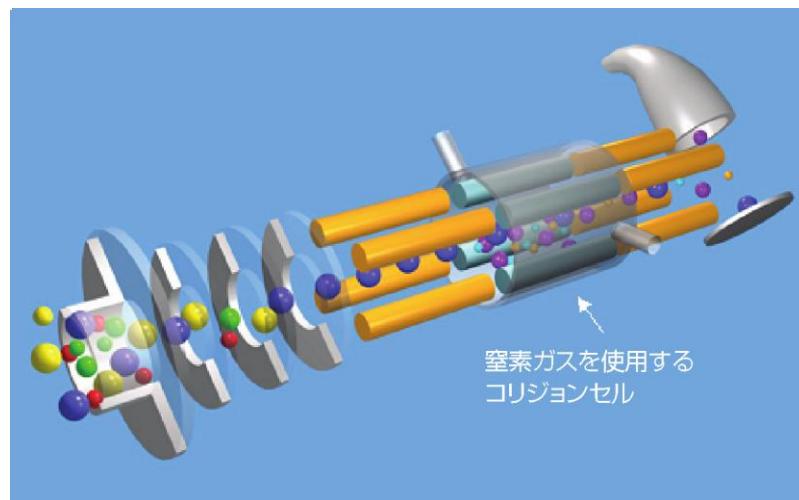
## マスアナライザー トリプル四重極 (QQQ)

### マルチプル反応モニタリング (MRM)



単一の  $m/z$  のプリカーサイオンがコリジョンセルに渡されます。窒素分子とのコリジョンによってフラグメントイオンが生成されます。Q3は、特定のフラグメントイオンの単一の  $m/z$  に設定されます。これは、非常に高感度な方法であり、定量に使用されます。

### フルスキャン MS/MS モード



SRM/MRM と比較したフルスキャンモードでの違いは、スキャンの機能です。Q3 は順次スキャンされ、一度に 1 つの  $m/z$  のみを検出器に渡すようになっています。プロダクトイオンのスペクトルが生成されます。この操作モードは、SRM/MRM と比較して感度が低くなります。



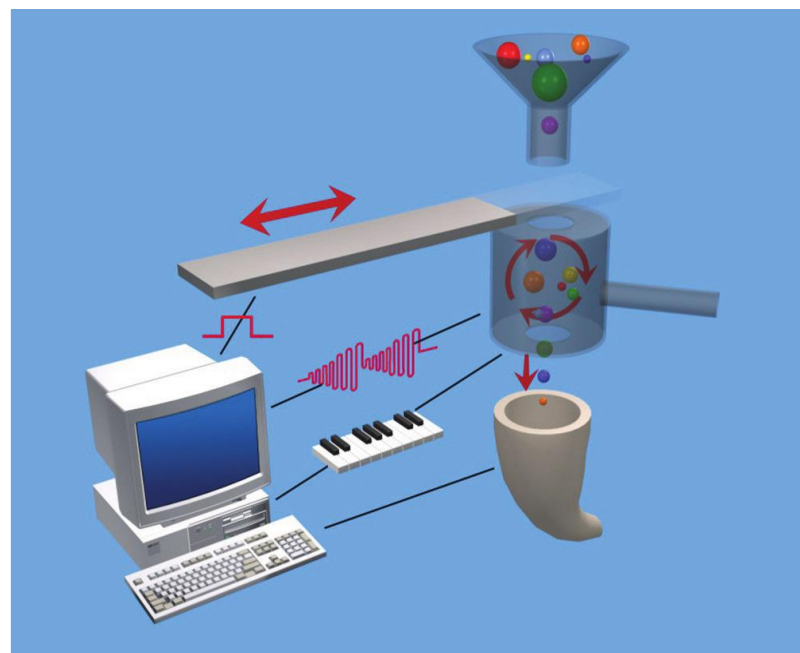
# 動作の仕組み

## マスアナライザー－イオントラップ (IT)

イオン源で生成された荷電イオンがマスアナライザに入ります。選択した質量範囲にわたる、選択した極性のすべてのイオンを、一度にトラップに保管できます。それらのイオンを、検出のタイミングまで、イオントラップマスアナライザで操作できます (複数の単離段階とフラグメンテーション段階を実行します)。

イオントラップは、4つの並列ロッドではなく、1つの円形リング電極と、「トラップ」を形成する2つのエンドキャップからなります。

受け取る情報: MS および MS/MS

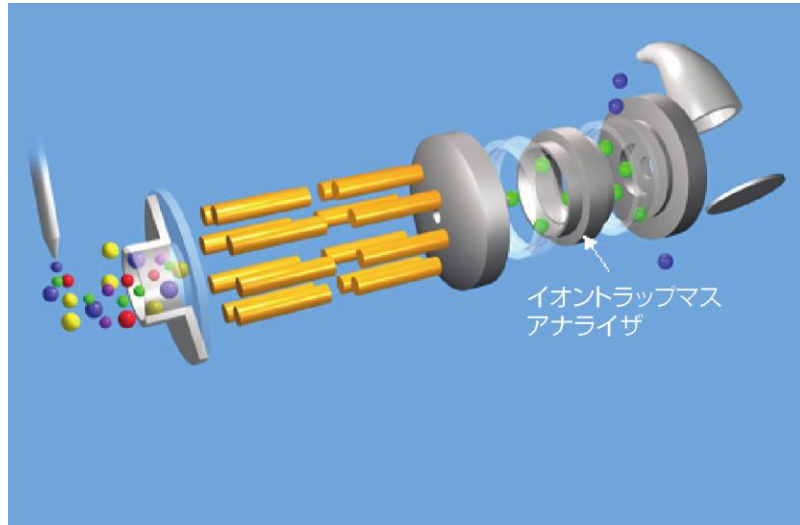


概念モデル－イオントラップ

# 動作の仕組み

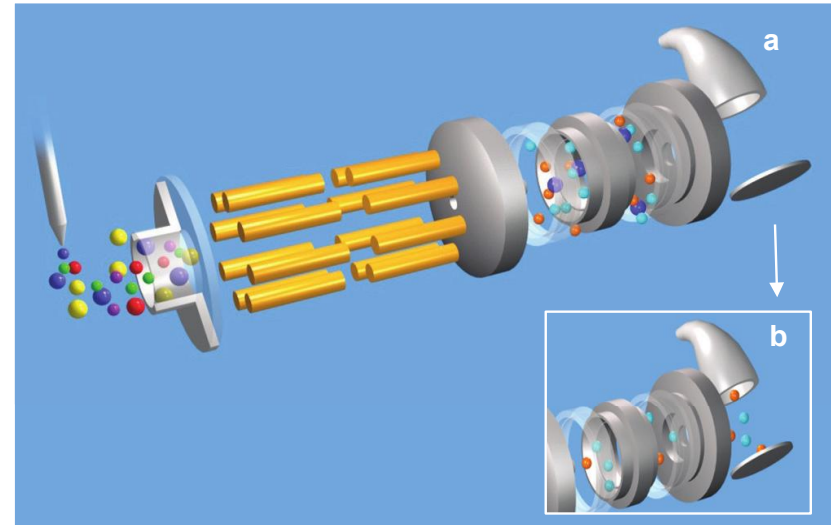
## マスアナライザー－イオントラップ (IT)

### ステップ 1: プリカーシオンの単離



イオン注入と蓄積が完了すると、イオンゲートが閉じ、イオンはマスアナライザに注入されなくなります。波形の部分は、プリカーサイオンを超える質量と下回る質量を排出するために適用されます。

### ステップ 2: プリカーシオンのフラグメンテーション



プリカーシオンの共鳴励起によって衝突誘起解離 (CID) が引き起こされ、プロダクトイオンが生成されます (a)。フルスキャンプロダクトイオンが検出器に排出されます (b)。

# 動作の仕組み

## マスアナライザ – 飛行時間型 (TOF)

イオン源で生成された荷電イオンがマスアナライザに入ります。

アナライザの構成要素

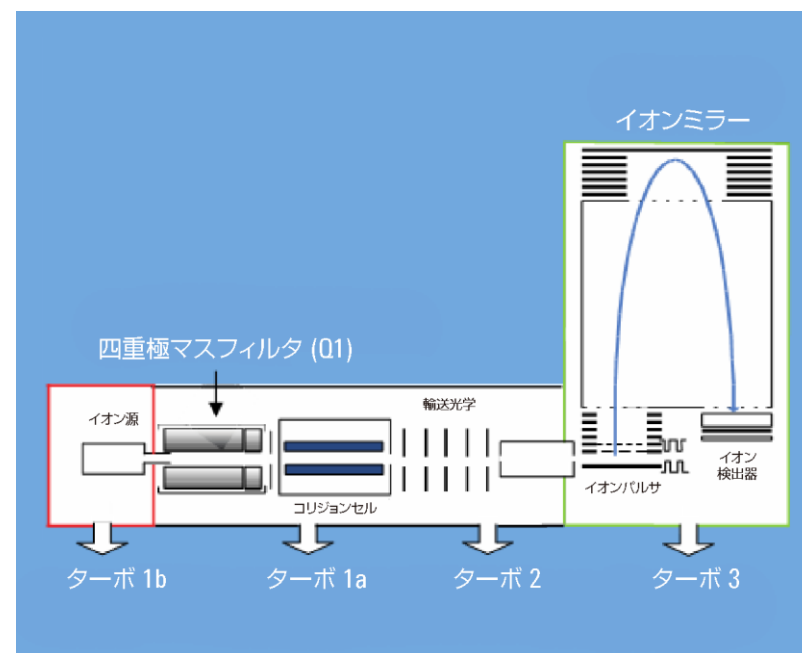
- マスフィルタ (Q1)、オプション
- フライトチューブ
- コリジョンセル (Q-TOF)

イオンは、四重極またはコリジョンセルを通過した後、イオンパルサに到達します。イオンを加速してフライトチューブに入れる高電圧パルスが適用されます。チューブの端のイオンミラーは、イオンを反射し、それらを検出器に送ります。検出器はイオンの到着の時刻を記録します。

受け取る情報:

TOF: MS のみ

Q-TOF: MS および MS/MS



飛行時間型質量分析計の概略図

出典: [飛行時間型質量分析装置](#)、図は Q-TOF を示します。

# 動作の仕組み

## マスアナライザー – 飛行時間型 (TOF)

各質量の飛行時間 ( $t$ ) は固有であり、イオンが加速されるエネルギー ( $E$ )、イオンが移動する必要のある距離 ( $d$ )、および  $m/z$  によって決まります。

$$E = 1/2mv^2$$

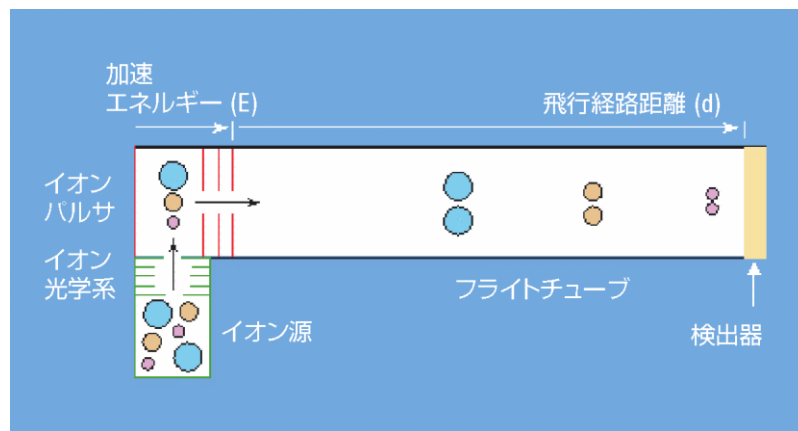
$m$  について解くと次のようになります。

$$m = 2E / v^2$$

$v$  について解くと次のようになります。

$$v = \sqrt{(2E / m)}$$

方程式 1



この方程式は、所定の運動エネルギー  $E$  の場合、大きい質量よりも小さい質量の方が、速度が大きくなることを示します。質量の小さいイオンの方が検出器に早く到達します。

速度は、イオンが検出器に到達するまでにかかった時間によって決まります (結果として質量も決まります)。

# 動作の仕組み

## マスアナライザー – 飛行時間型 (TOF)

2 番目の方程式はよく知られており、距離 (d) を時間 (t) で除算して速度 (v) を求めるものです。  $v = d / t$

方程式 1 および 2 を結合すると、次のようになります。  $m = (2E / d^2)t^2$

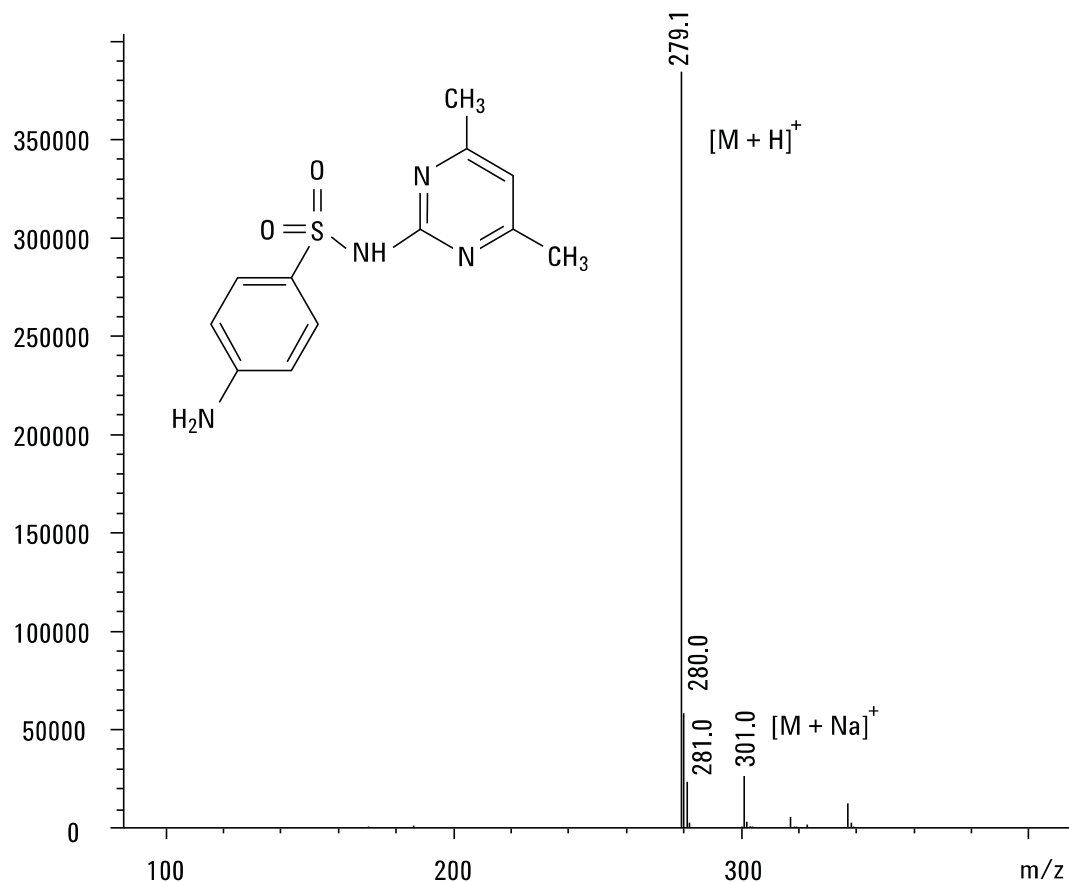
所定のエネルギー (E) および距離の場合、質量はイオンの飛行時間の二乗に比例します。E および d は定数のままであり、変数 A にまとめられています。

これで方程式が単純になります。  $m = A \cdot t^2$

正確を期するためには、高電圧を適用するための遅延時間も考慮に入れる必要があります。  $t = t_m - t_0$

最終的な方程式は次のようになります。  $m = A(t_m - t_0)^2$

# 結果 例 1



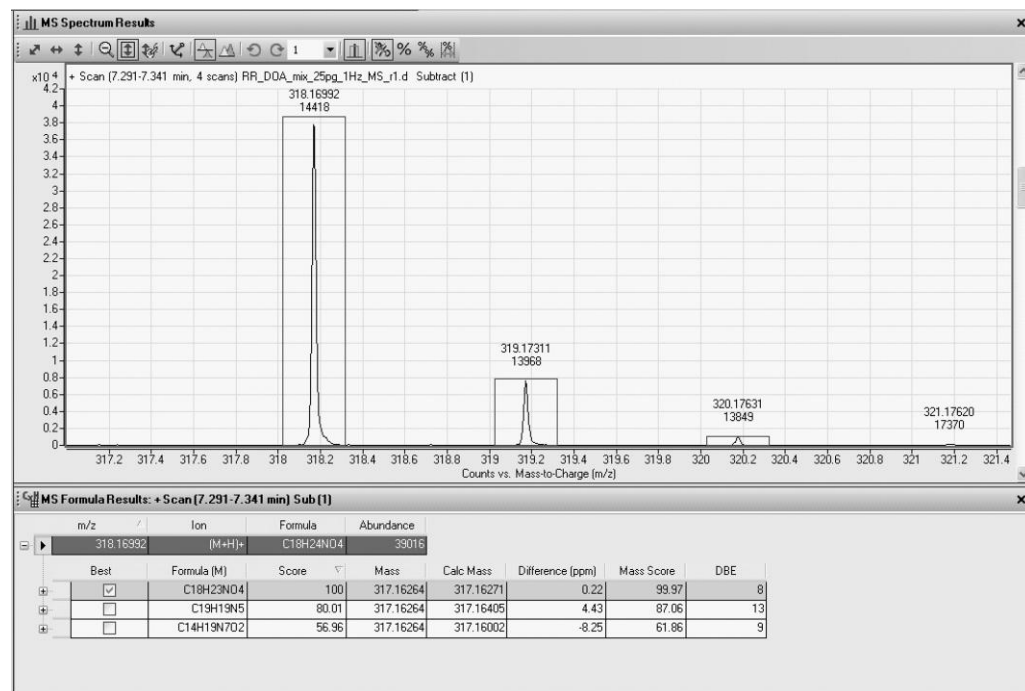
シングル四重極マスアナライザで  
分析した**スルファメタジン**の質量  
スペクトル

分子式  
[M+H]<sup>+</sup>:

**C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>S**  
279.33

スルファメタジンの質量スペクトル。  
出典: [G1960-90083](#) (p 17)

# 結果 例 2



Q-TOF マスアナライザでの  
コカエチレン の質量スペクトル

分子式  
[M+H]<sup>+</sup>:

**C<sub>18</sub>H<sub>23</sub>NO<sub>4</sub>**  
**318.387**

コカエチレンの質量スペクトル。  
出典: 血中の薬物検査における LC/MS 手法の比較 (図 36)



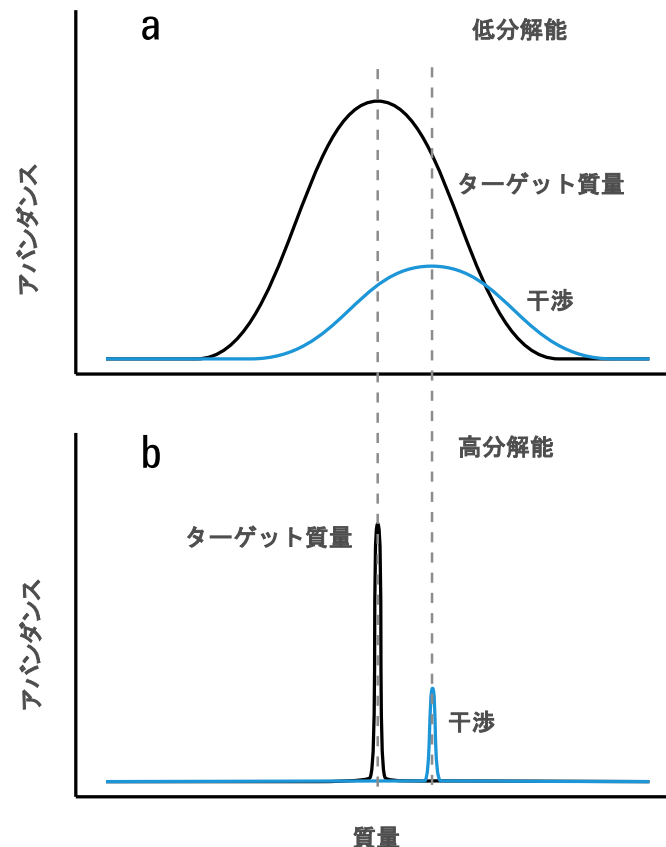
# 結果

## シングル四重極と高分解能 TOF

シングル (トリプル) 四重極を使用した分析では、整数質量情報 (低分解能) が提供されますが、飛行時間型機器は、精密質量情報 (高分解能) が提供されます。

飛行時間型分析において実現可能な最高の質量精度を達成できるように、TOF システムの継続的なキャリブレーションが必要です。測定値の狂いは、通常は数 ppm のみです。

質量分解能と質量精度が十分であれば、TOF 質量分析計は元素構成を明確に確認できます。

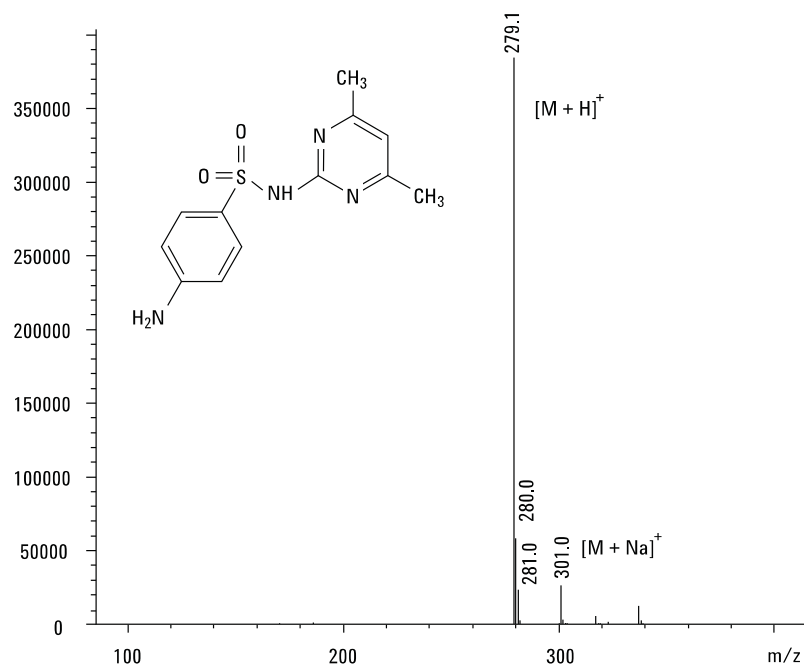


シングル四重極 (a) と飛行時間型 (b) ソースの分解能。出典: [5989-2549EN](#) (p 14)

# 結果

## シングル四重極と TOF

### 標準的なシングル四重極 質量スペクトル

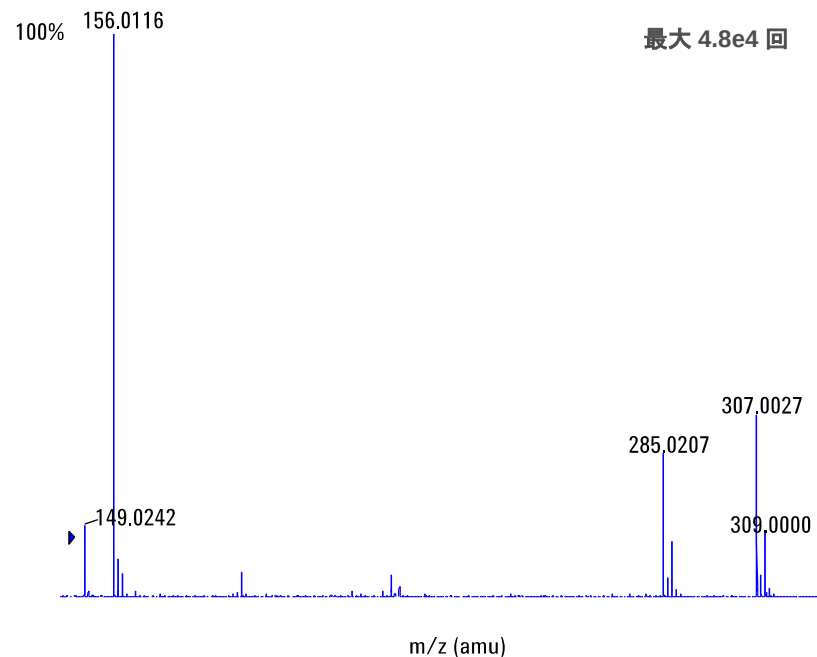


スルファメタジンの質量スペクトル。

出典: [G1960-90083](#) (p 17)

### 標準的な TOF 質量スペクトル

■ +TOF MS: 実験 2、0.932~1.007 分、sulfa 284 a.wiff から、アジレント



付加体およびフラグメントイオンがあるスルファクロロピリ  
ダジンの質量スペクトル出典: [5989-2549EN](#) (p 25)

# 結果

## 多価イオンおよびデコンボリューション

分析された分子とイオン化技法によっては、多価イオンが生成されることがあります。

低分子と APCI は、一価分子を提供します。

測定された  $m/z$  は、電荷キャリアを減算 (ポジティブイオン) または加算 (ネガティブイオン) した分子量に対応します。

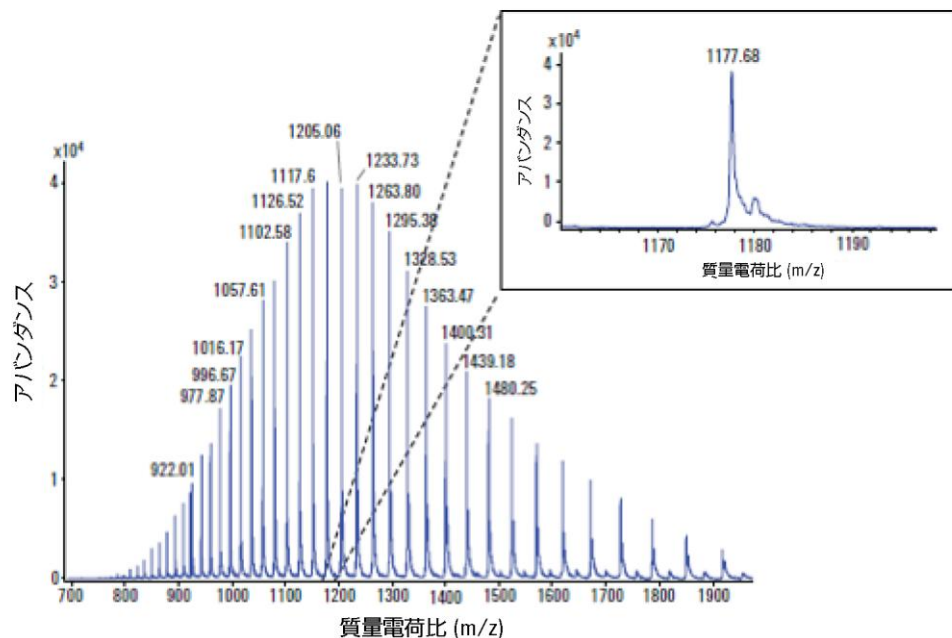
ESI を使用してイオン化された大型の分子 (ペプチド、タンパク質) の場合、複数の潜在的な電荷をもつ部位が存在し (プロトン化または脱プロトン化のため)、多価イオンが発生する可能性があります。

これにより、質量分析で、抗体などの大型の分子 ( $> 1 \text{ Mio Da}$ ) に対応できるようになります。測定されたイオンが、さらに容易に測定できる  $m/z$  範囲にシフトされるためです。

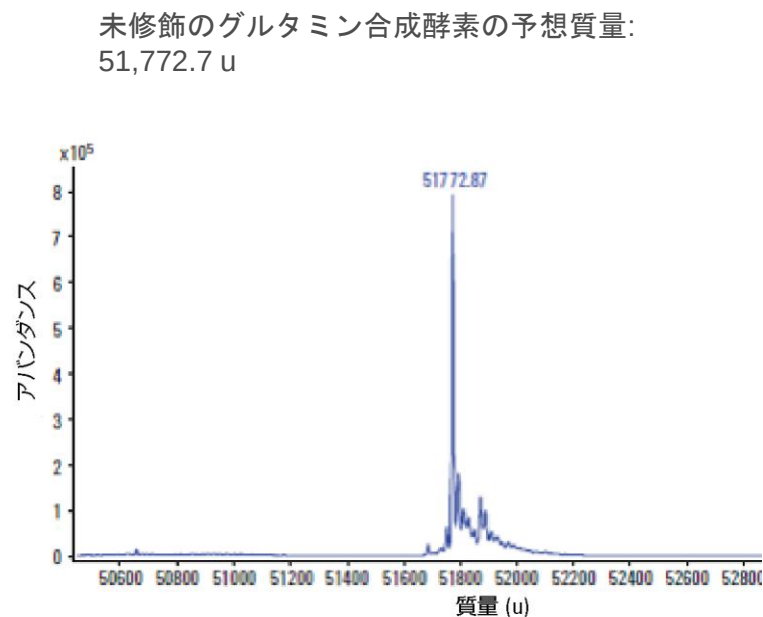
測定された  $m/z$  から実際の分子量を確定するには数学的なアルゴリズムが必要です。このプロセスは、デコンボリューションとして知られています。

# 結果

## 多価イオンおよびデコンボリューション – 例



発現したグルタミン合成酵素の質量スペクトル



発現したグルタミン合成酵素の  
デコンボリュートした質量スペクトル

出典: [Accurate-Mass LC/TOF-MS for Molecular Weight Confirmation of Intact Proteins](#) (図1、P.4)

# 省略記号・略語

| 省略記号・略語  | 定義                |
|----------|-------------------|
| APCI     | 大気圧化学イオン化         |
| APPI     | 大気圧光イオン化          |
| CI       | 化学イオン化            |
| CID      | 衝突誘起解離            |
| <i>D</i> | ドーパント (APPI)      |
| Da       | ダルトン              |
| EI       | 電子衝撃              |
| ESI      | エレクトロスプレーイオン化     |
| GC       | ガスクロマトグラフィー       |
| GC/MS    | ガスクロマトグラフィー/質量分析法 |
| ICP      | 誘導結合プラズマ          |
| IT       | イオントラップ           |

| 省略記号・略語    | 定義                 |
|------------|--------------------|
| LC/MS      | 液体クロマトグラフィー/質量分析法  |
| <i>M</i>   | 分子イオン              |
| MALDI      | マトリックス支援レーザー脱離イオン化 |
| MMI        | マルチモードイオン化         |
| MS         | 質量分析               |
| <i>m/z</i> | 質量電荷比              |
| QQQ        | トリプル四重極            |
| SIM        | シングルイオンモニタリング      |
| SH         | 溶媒分子               |
| SQ         | シングル四重極            |
| MRM        | マルチプル反応モニタリング      |
| (Q) - TOF  | 飛行時間型              |



# 詳細情報

アジレント製品の詳細については、[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp) をご覧ください。

本プレゼンテーションに関するご質問やご提案をお寄せいただく場合は、[academia.team@agilent.com](mailto:academia.team@agilent.com) までご連絡ください。

| 文献         | タイトル (日本語と記載のないものはすべて英文です)                                                                          | 資料番号          |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| マニュアル      | <a href="#">Agilent 7000 シリーズトリプル四重極 GC/MS 操作マニュアル (日本語)</a>                                        | G7000-90044   |
| ガイド        | <a href="#">Agilent 6100 シリーズ四重極 LC/MS システム – コンセプトガイド (日本語)</a>                                    | G1960-96079   |
| アプリケーション一覧 | <a href="#">Time-of-Flight Solutions in Pharmaceutical Development – the Power of Accurate Mass</a> | 5989-2549EN   |
| 技術概要       | <a href="#">飛行時間型質量分析 (日本語)</a>                                                                     | 5990-9270JAJP |
| アプリケーション   | <a href="#">Accurate-Mass LC/TOF-MS for Molecular Weight Confirmation of Intact Proteins</a>        | 5989-7406EN   |
| アプリケーション   | <a href="#">血中の薬物検査における LC/MS 手法の比較 (日本語)</a>                                                       | 5990-3450JAJP |
| ビデオ        | <a href="http://www.agilent.com/chem/teachingresources">www.agilent.com/chem/teachingresources</a>  |               |
| イメージ       | <a href="http://www.agilent.com/chem/teachingresources">www.agilent.com/chem/teachingresources</a>  |               |





# THANK YOU

資料番号 5991-5857JAJP

