

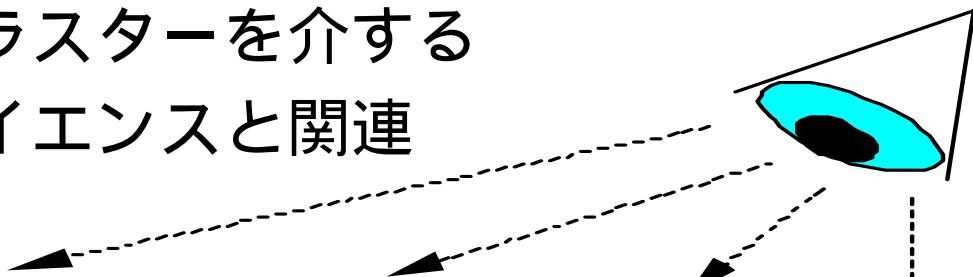
質量分析学とは

横浜市立大学・高山光男

- ・ 原子・分子・クラスターを介するすべてのサイエンスと関連
- ・ 質量分析学はハイブリッドサイエンス(複合科学)
- ・ 質量分析情報をうまく使って研究する学問

原子・分子・クラスターを介する すべてのサイエンスと関連

マスペクトロメトリーの目

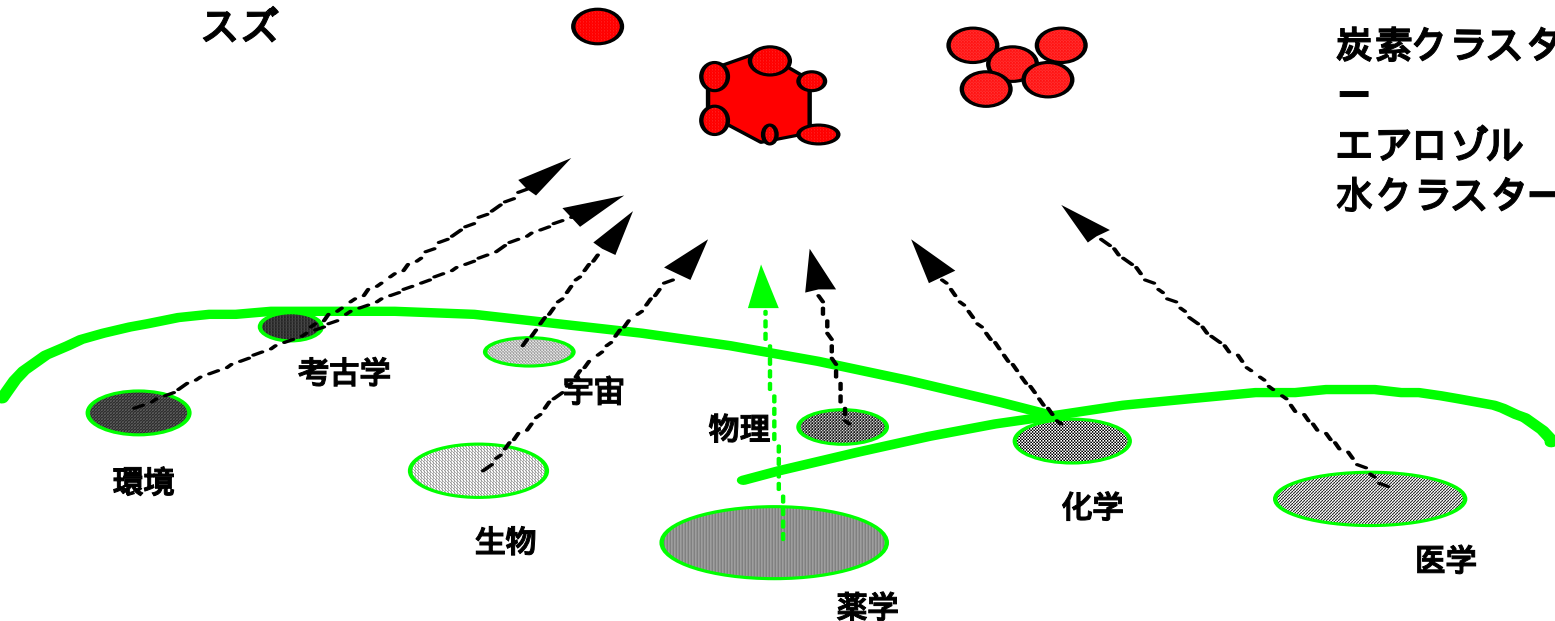


ケイ素
炭素
鉄
スズ

脂肪酸
セロトニン
アセチルコリン
環境ホルモン

PCB
ダイオキシン
核酸
タンパク質

炭素クラスター
エアロゾル
水クラスター



サイエンスの丘

質量分析学はハイブリッドサイエンス



- 原子・分子・クラスター化学

無機化学, 有機化学, 物理化学, 有機電子論, 量子化学,
化学結合論, エネルギー論(熱化学), 化学反応論, ...

- 原子・分子・クラスター物理学

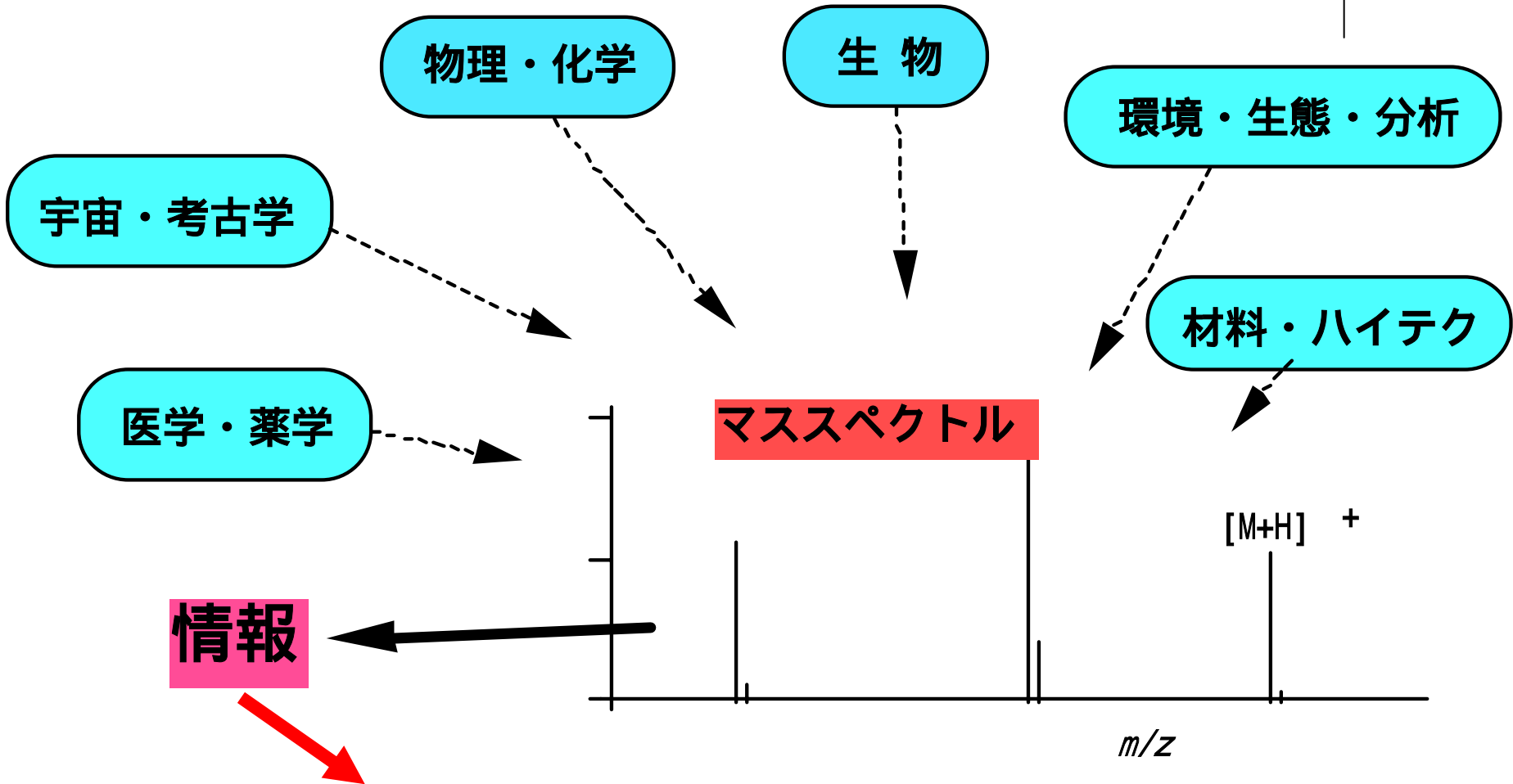
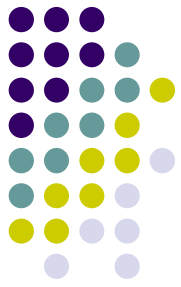
電磁気学, 質点の力学, 衝突論, ...

- 原子・分子・クラスター生化学

生体分子, 生体高分子(タンパク質, 核酸, 糖鎖), 分子間
相互作用

質量分析情報をうまく使って研究する学問

(または、質量分析情報の利用法を研究する学問)

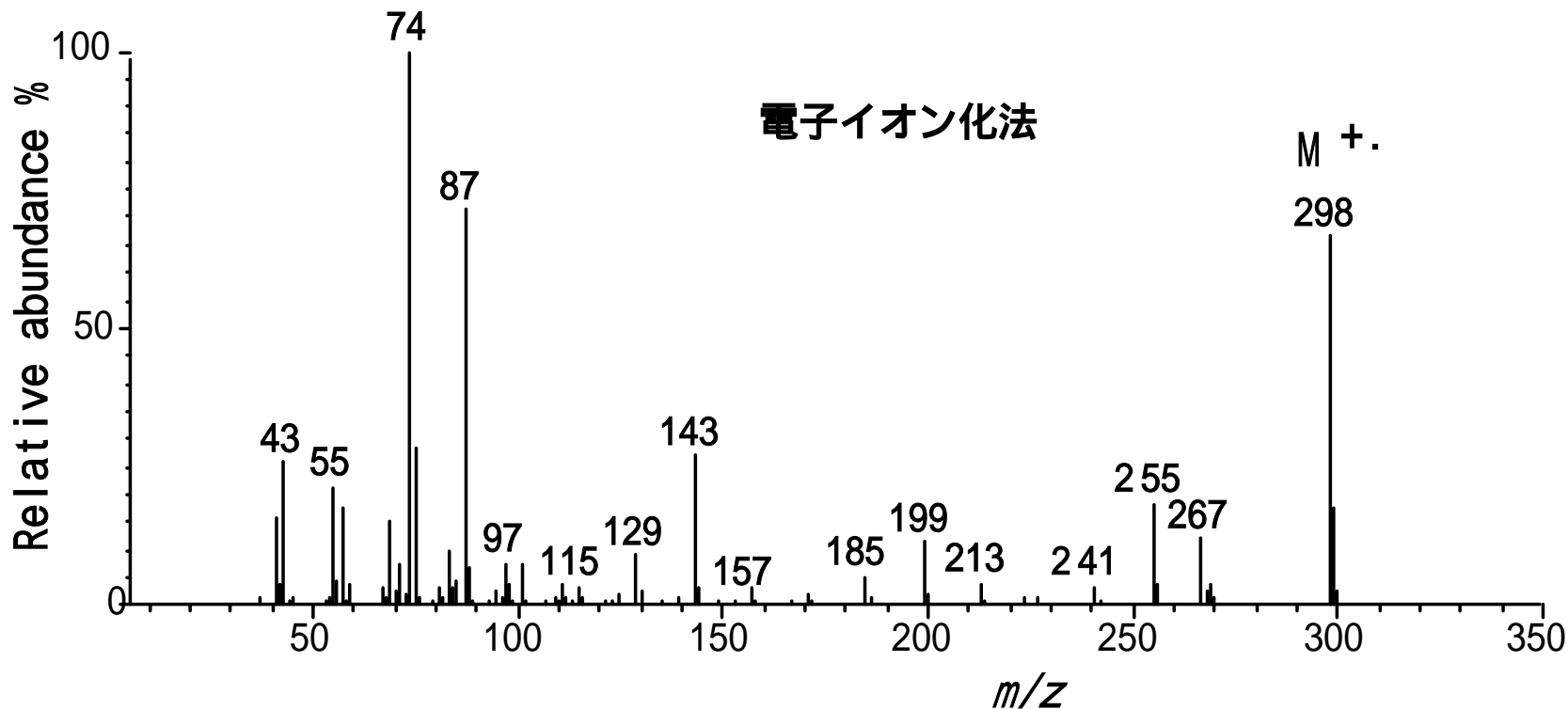


情報の利用法は分野によって様々

マススペクトルと質量分析情報



[m/z , $I(m/z)$]



基本的な質量分析情報は、各イオンピークの質量電荷比 m/z の値とその強度 $I(m/z)$

基本的な質量分析情報

- 各ピークの質量電荷比の値: m/z

- 各イオンのピーク強度: $I(m/z)$

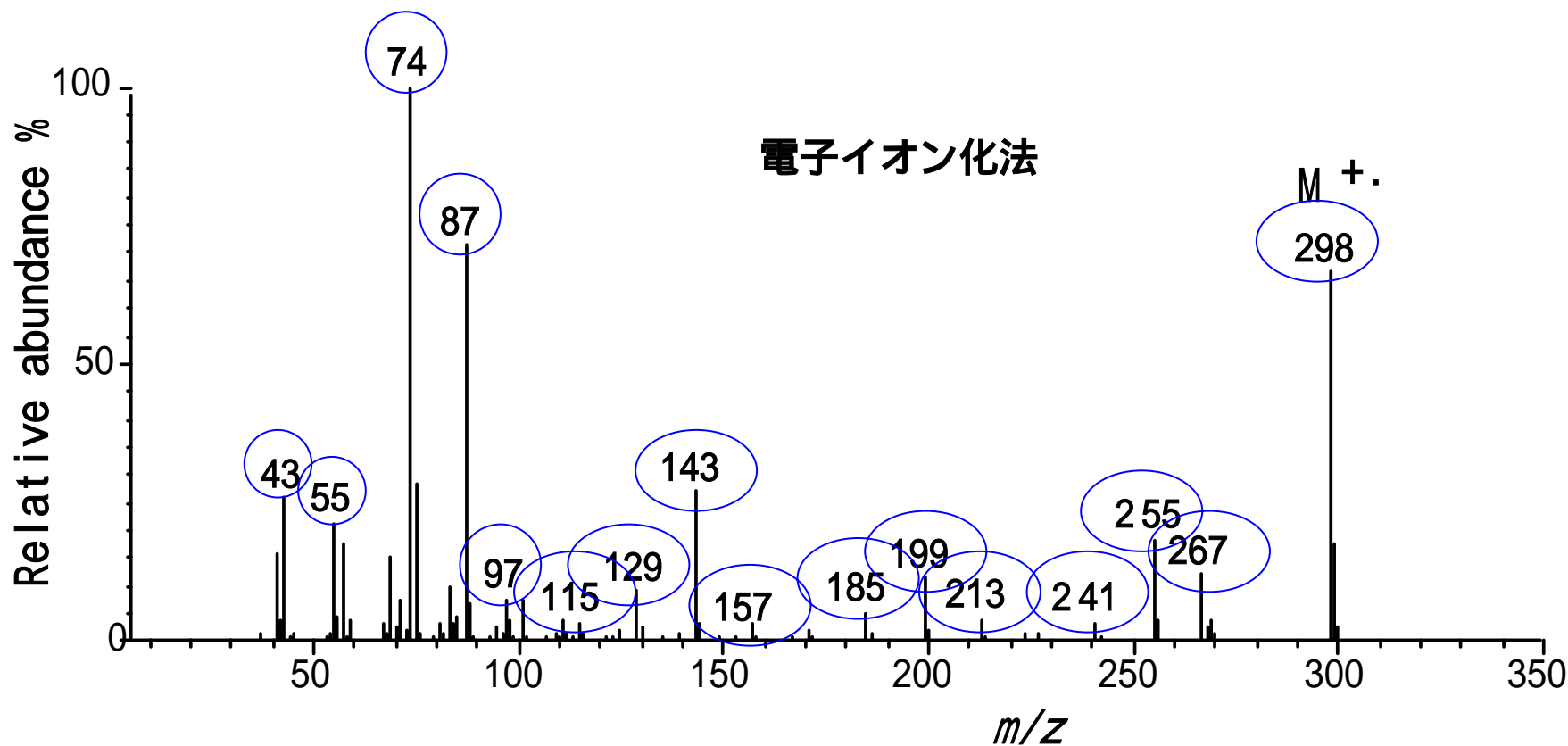
- ある操作前後での m/z 値の差:

$$(m/z) = (m/z)_2 - (m/z)_1$$

m/z 値の集合を利用



電子イオン化法におけるデータベース検索と化合物同定



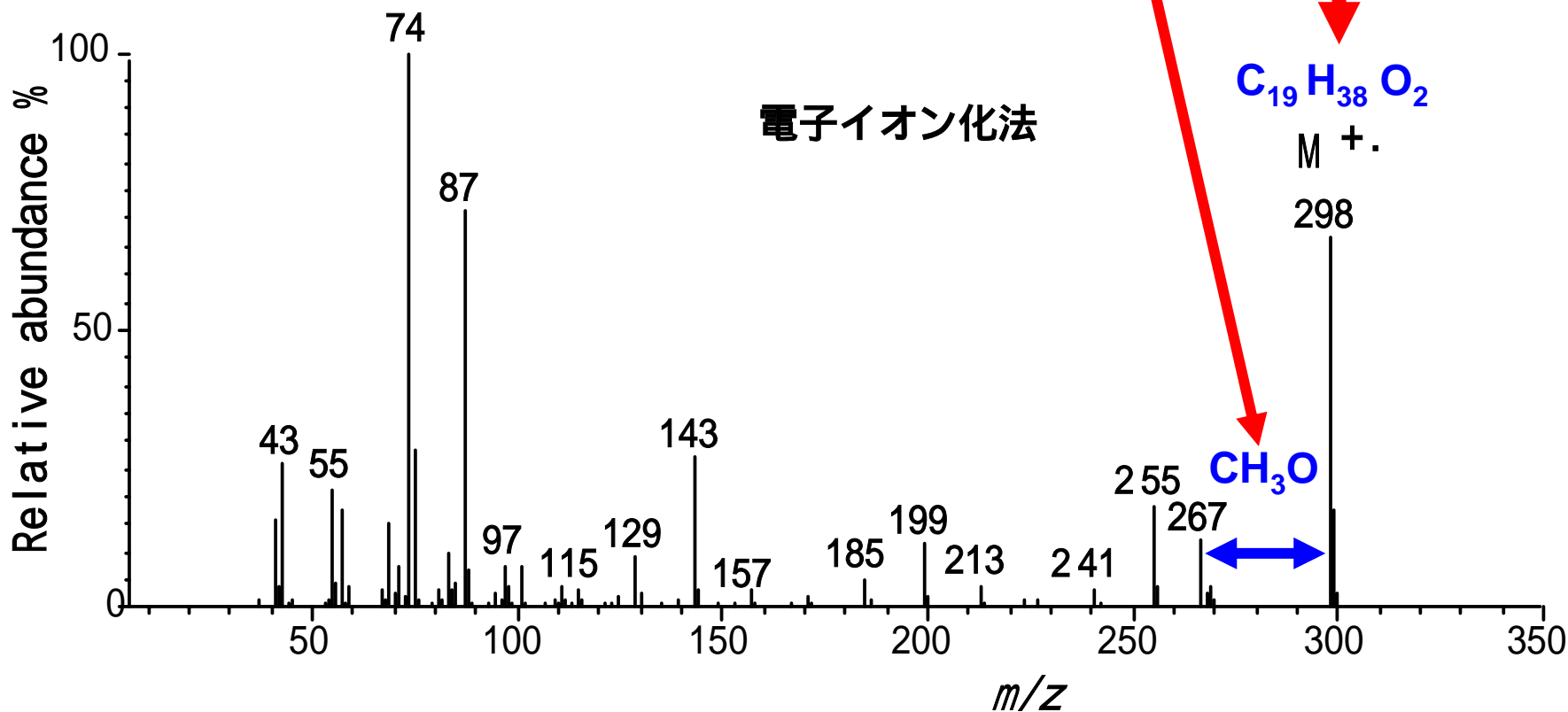
m/z 値の精密な値を利用



分子イオン M^+ の精密質量: $298.2871804 - m_e (0.00054858) = 298.2866318$

フラグメントイオンの精密質量とピーク間の精密質量

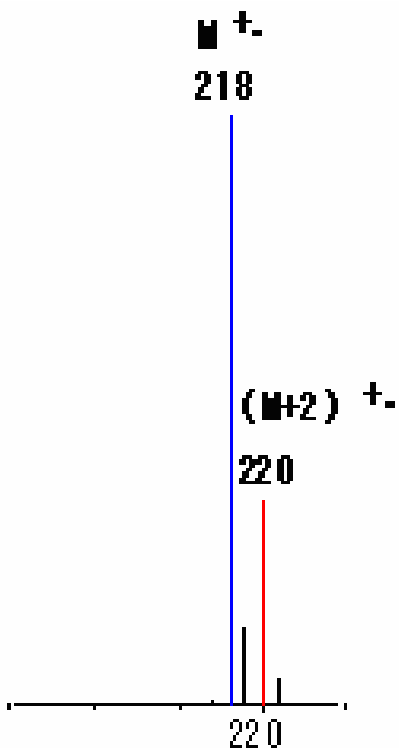
元素組成の推定



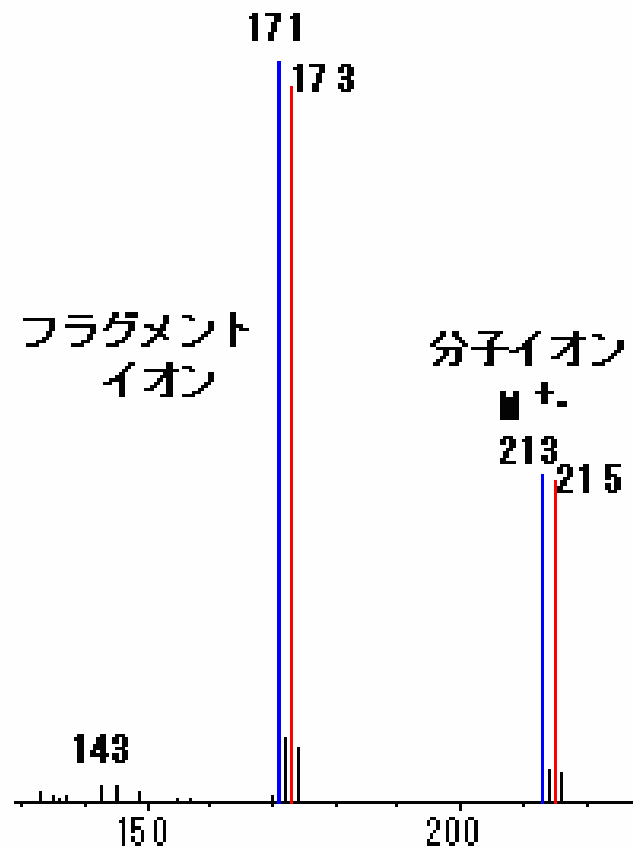
同位体イオンのピーク強度 $I(m/z)$ を利用



元素組成の推定

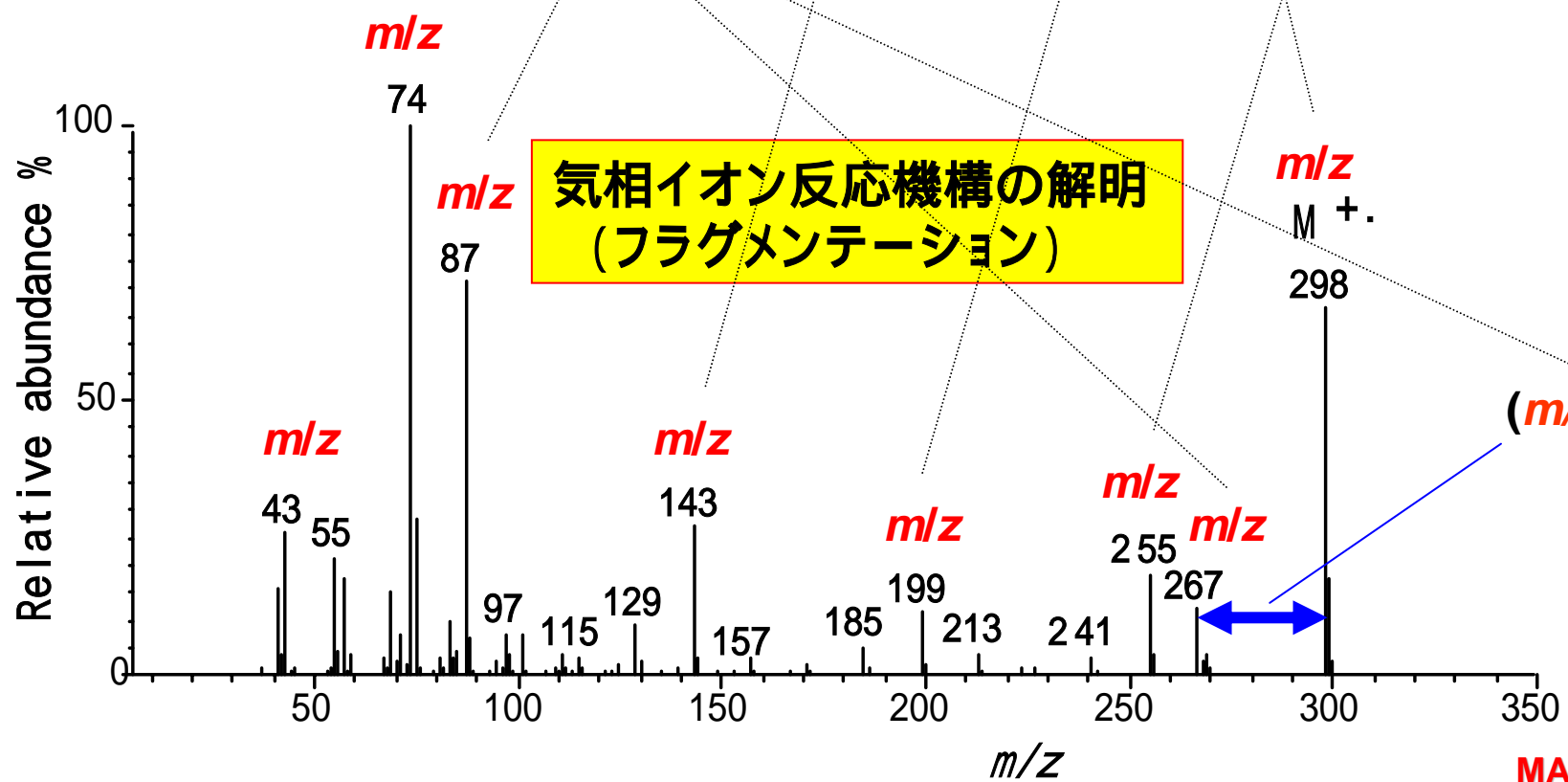
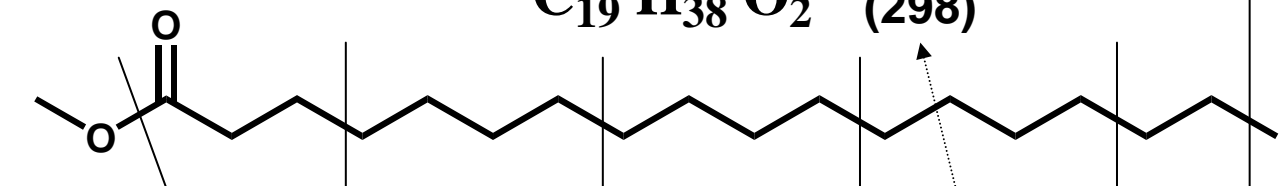
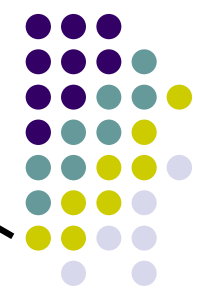
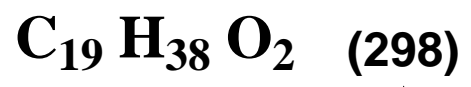


クロロベンゼン
p-ダイオキシベンゼン
 $C_{12}H_{10}O_2Cl$

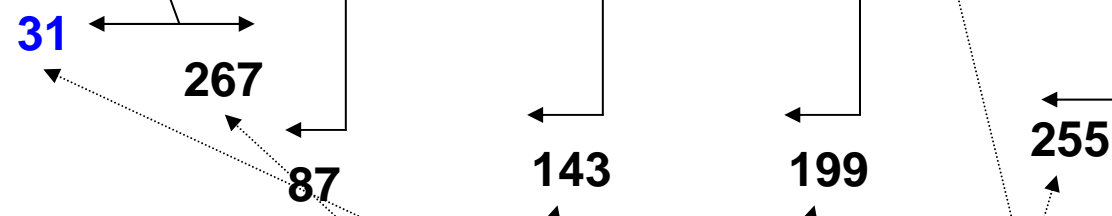


パラブromoアセトアニリド
 $C_{10}H_9NOBr$

総合情報を利用



気相イオン反応機構の解明
(フラグメンテーション)



質量分析学とは

- 正確な質量分析情報を得て、
- 得られた質量分析情報を個別のサイエンスの問題と関連づけて解決し、
- さらに関連づけの方法論(ロジック)を提出する学問。

安定なイオンを生成させる

