

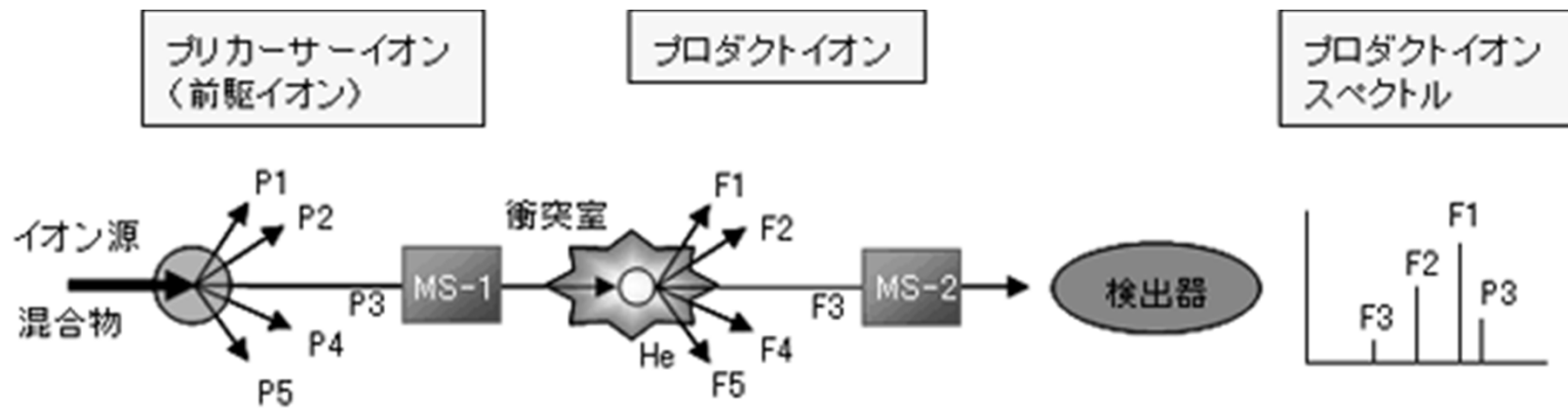
機器紹介 (GCMS)



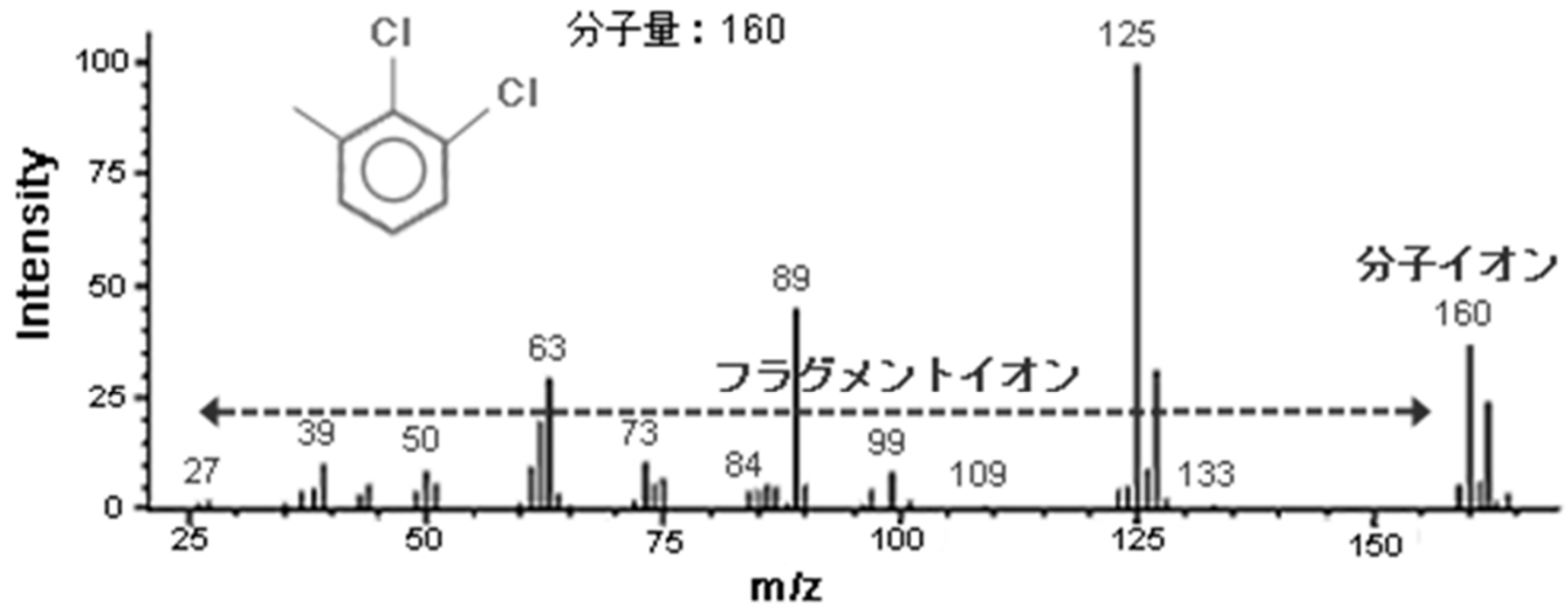
○シングルMS

○NISTライブラリー(24万種の化合物のマスペクトル情報)

MSについて



MSについて



GCMSとLCMS/MS

- LCMS/MSでは、一つ目の四重極ではフラグメントイオンは発生しない。
コリジョンセルでフラグメントイオンを発生させるが定量のため、物質特異なイオンが発生できるように電圧を調整できる。
物質ごとに電圧を調整する必要がある。
LCの差で保持時間も変わり、電圧の条件が異なるため。
ライブラリーは存在せず自身で標準品で作成。

GCMSとLCMS/MS

○ GCMSでは最初のイオン化で、
分子イオンとフラグメントイオンになる。
電圧は70 eVで使用

(どのメーカーでも)

どのメーカーのGCMSでも同じ分子は同じマ
ススペクトルになる

ライブラリーが充実！

NISTライブラリー (24万種の化合物のマススペクトル情報)

GCMSを使えば

標準品がなくても

ある程度同定はできる。（カラムで分離できない場合等、誤同定される可能性あり）

（試験した結果、有用なデータを得た成分のみ標準品と比較して最終的に同定すればよい）

GCMSで実験しよう！

⇒H26年度研究実施データベースが充実している水溶性成分を測定した。

H27年度のテーマ

水溶性成分は、データベースがあり、試料を調製し測定すれば、すぐ結果が出た。

多変量解析によりヤマトトウキは、北海道帰と比較してGABA、ロイシンを多く含むことが示唆され、個別定量の結果、実際に多く含むことを確認した。

トウキといえば「精油」

揮発性成分を測定しなくては。。。。。

課題



リグスチリド等の精油、アルキルピラジン類は、揮発するので、TMS化しなくてもGCで測定可能だが、データベースがなく同定できない)

⇒自身でデータベース作成

課題

⇒各種トウキの試料を測定し、検出したピークのマススペクトルについてNISTライブラリーと比較。一致率の高い成分名で保持時間とともにデータベースに登録。

⇒標準物質のあるものは、標準物質自身を測定し、保持時間とともにデータベースに登録。

課題

文献のアルキルピラジン類の測定

⇒数Lのジクロロメタンで抽出し、数mL
まで

濃縮し、測定。

○ 7 1 検体処理できる？