

『バイオサイエンスのための基礎化学』 12章練習問題 解答

1. フラグメントイオンの間隔は 1 u (u は統一原子質量単位) であり, m/z 16 から水素 (H) が 1 個ずつ脱離していることがわかる. 炭素と水素の原子質量数は 12 と 1 なので, $12 + 4 = 16$ u となる. そこで 16 の質量をもつ炭化水素はメタン (CH_4) であることがわかる. また m/z 16 は M^+ (分子イオンピーク: 最も大きな質量数のピーク) であることもわかる.

2. a. ペプチドの側鎖にはイオン性の官能基が多いことから, 多価イオン ($2+$, $3+$, $2-$, $3-$ など) でイオン化することがある. 質量分析の値は質量電荷比 (m/z) であるから, 1 価イオン (z) の場合は

$$[\text{M}+\text{H}]^+ = 1045.5 + 1 = 1046.6$$

$$m/z = 1046.6 / 1 = 1046.6$$

となる. 2 価イオンの場合は

$$[\text{M}+2\text{H}]^{2+} = 1045.5 + 2 = 1047.6$$

$$m/z = 1046.6 / 2 = 523.8$$

となる. 同位体シグナルとの質量差にも影響が出ることがわかる. m/z 1046.6 の同位体シグナルが m/z 1047.6 であれば, 質量差は 1 である. これは

$$m/z \ 1047.6 = [(\text{M}+1)+\text{H}]^+$$

ということである. m/z 523.8 の同位体シグナルが m/z 524.3 であれば, 質量差は 0.5 である.

これは

$$m/z \ 524.3 = [(\text{M}+1)+2\text{H}]^{2+}$$

ということである. そして 10 価イオンの場合は, 質量差が 0.1 になる. 逆にいえば, この同位体スペクトルの質量差からイオンの価数がわかる.

- b. m/z 1046.6 と m/z 1047.6 が分離されるためには

$$\Delta m = 1$$

でなければならない. $R = m / \Delta m$ から

$$1046.6 / 1 = 1046.6$$

$R = 1100$ 程度で分離する. m を 1047.1 としてもよい.

同様に m/z 523.8 と m/z 524.3 が分離されるためには

$$\Delta m = 0.5$$

でなければならない. $R = m / \Delta m$ から

$$523.8 / 0.5 = 1047.6$$

$R = 1100$ で分離する, m を 524.0 としてもよい.