

Application Data Sheet

No.61

GC-MS

Gas Chromatograph Mass Spectrometer

GC-MS/MSによるスキャン/MRMを用いた ラット尿中の代謝物分析 (2)

GCMS-TQ8030は、スキャンとMRMのデータを同時に測定するスキャン/MRMモードに備えたGC-MS/MSです。スキャン/MRMモードを用いると、MRMによる高い選択性による高感度な分析を、スキャンによるマススペクトルを用いた定性分析を同時に行うことが可能です。これらの特長を生かし、ターゲット成分はMRMで正確な定量を行い、ターゲットではない未知成分はスキャンで得られたマススペクトルをライブラリサーチで定性することが可能です。本アプリケーションデータシートでは、ラット尿から抽出した代謝物をスキャン/MRMで測定を行い、ターゲットである5成分をMRMで測定し、未知ピークについてはスキャンで得られたマススペクトルでライブラリサーチし同定した結果を紹介합니다。

実験

ウレアーゼ処理直接乾燥法^[1]を用いて、ラット尿をトリメチルシリル化した試料を測定しました。

分析条件

測定モードは、スキャン/MRMを使用しました。分析条件をTable 1に示します。

Table 1 分析条件

GC-MS	:GCMS-TQ8030		
カラム	:DB-5 (長さ 30m, 0.25mm I.D., df=1.0 μm)		
[GC]		[MS]	
酸化室温度	:280°C	インターフェース温度	:280°C
カラムオープン温度	:100°C(4分)→(4°C/分)→320°C(0分)	イオン源温度	:200°C
注入モード	:スプリットレス	チューニングモード	:標準
サンプリング時間	:1 分	測定モード	:スキャン/MRM
キャリアガス制御	:線速度 (39.0 cm/秒)	質量範囲	:m/z 45 - 600
注入量	:1 μL	スキャンイベント時間	:0.2秒
		スキャンスピード	:3,333 u/秒
		測定モード	:MRM

MRMモニタリングm/z

Compound name	RT (min)	Quantitative Transition		Qualitative Transition	
		Precursor>Product	CE (V)	Precursor>Product	CE (V)
Lactic acid-2TMS	7.51	219 > 149	8	219 > 191	5
Glycerol-3TMS	14.711	218 > 159	6	218 > 113	14
Glutaric acid-2TMS	18.827	158 > 116	8	158 > 101	15
Adipic acid-2TMS	22.078	275 > 141	8	275 > 111	10
Suberic acid-2TMS	27.76	303 > 109	12	303 > 191	4

[1] I. Matsumoto, T. Kuhara, Mass Spectrom. Rev. 15 (1996) 43.

分析結果

ラット尿中の代謝物をスキャン/MRMモードで測定したスキャンのトータルイオンクロマトグラムとMRMのマスクロマトグラムをFig. 1に示します。また、Fig. 2、Fig. 3にスキャンで測定されたマススペクトルとライブラリサーチでヒットしたライブラリマススペクトルを示します。

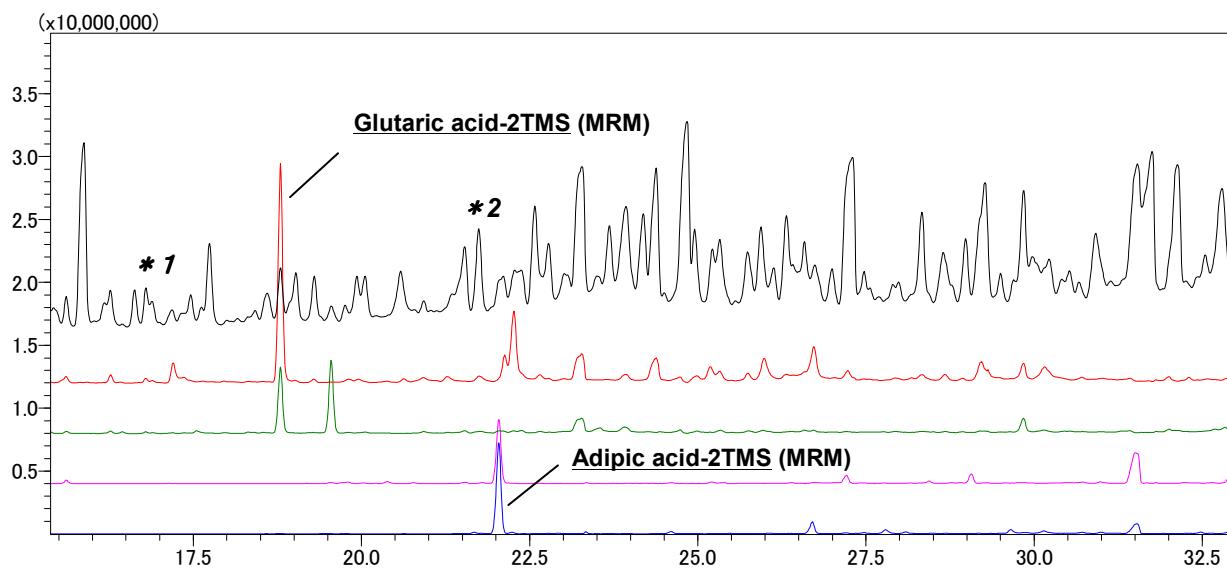


Fig. 1 ラット尿中の代謝物をスキャン/MRMで測定したスキャン部のトータルイオンクロマトグラム
黒: スキャントータルイオンクロマトグラム, 赤: MRMトランジション 158 > 116, 緑: MRMトランジション 158 > 101,
紫: MRMトランジション 275 > 141, 青: MRMトランジション 275 > 111

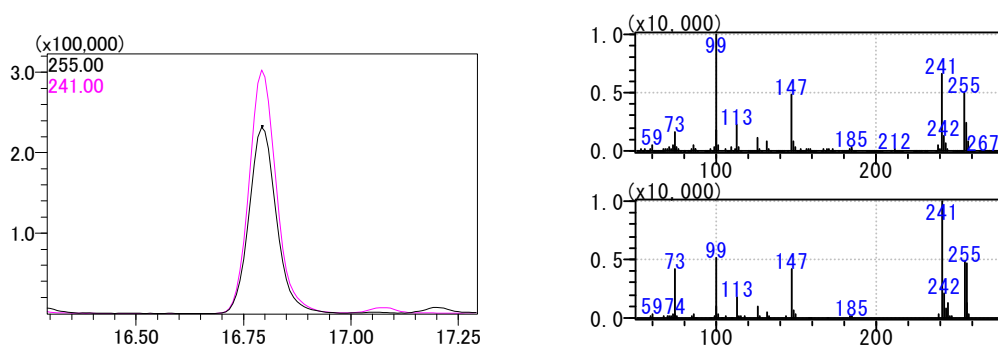


Fig. 2 Uracil-2TMS(*1)のスキャンマスクロマトグラムとマススペクトル (上段: 測定スペクトル、下段: ライブラリスペクトル)

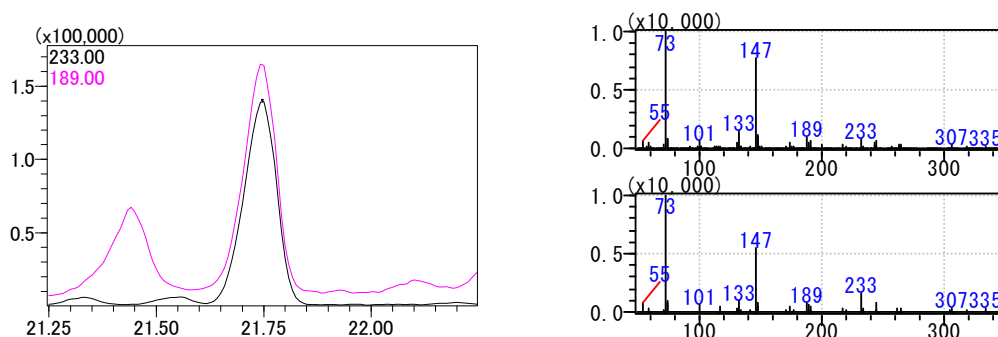


Fig. 3 Malic acid-3TMS(*2)のスキャンマスクロマトグラムとマススペクトル (上段: 測定スペクトル、下段: ライブラリスペクトル)

このデータ集は弊社が得た情報および内容のままにご提供するものであり、作成に当たり万全を期していますが、その正確性および特定の目的における有用性について保証するものではありません。弊社は、このデータ集の使用により直接的または間接的に生じたいかなる損害に対しても責任を負えないものであり、その使用により生じた結果および現象については使用者の責任とします。また、このデータ集の内容は将来予告なしに変更することがあります。

Copyright © 2012 Shimadzu Corporation. All right reserved.