

# 開催報告【WEB】令和5年度質量分析講習会 -LC/MSにおけるマススペクトル解析の基礎-2-

【開催日時】 2023年年8月25日(金) 13時30分～16時00分 (途中参加・途中退室可)

【場所】 WEB ミーティング(ZOOM)

【世話人】 質量分析技術者研究会 講習会担当：大阪大学 三宅里佳、  
奈良先端科学技術大学院大学 西川嘉子、鳥取大学 横野瑞希、北海道大学 岡征子、  
名古屋大学 瀧健太郎、大阪公立大学 江上美佳

【講師】 高橋 豊 氏 (エムエス・ソリューションズ株式会社)

【参加対象者】 MS測定経験者および今後、測定する予定のある方。

【参加者】 25人

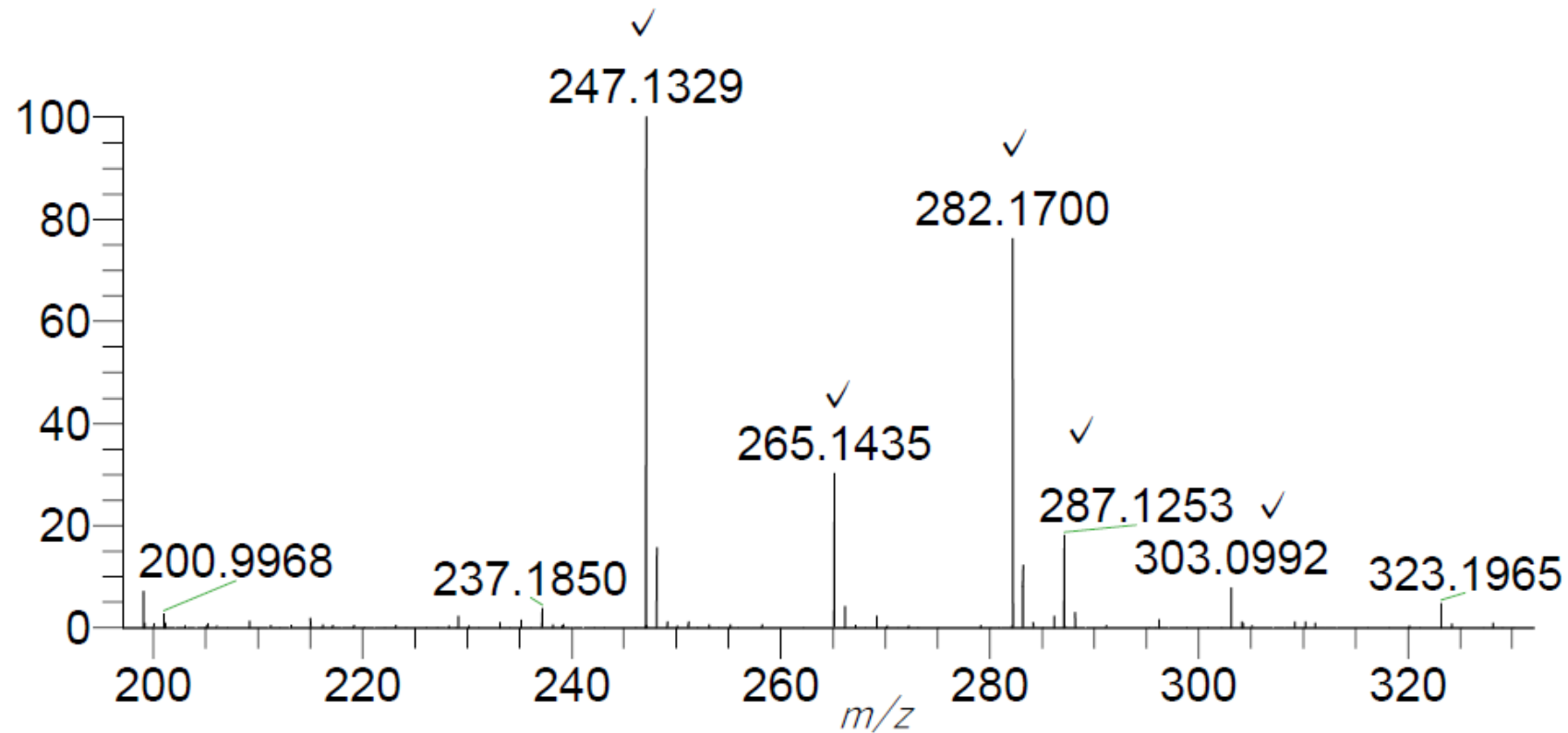
## 【プログラム】

13:30-16:00

- (1) イオン種の解釈について、応用編
- (2) MS/MSにより得られるプロダクトイオンスペクトルの解析、応用編
- (3) マススペクトルとプロダクトイオンスペクトルの解析演習

# 事前課題 1

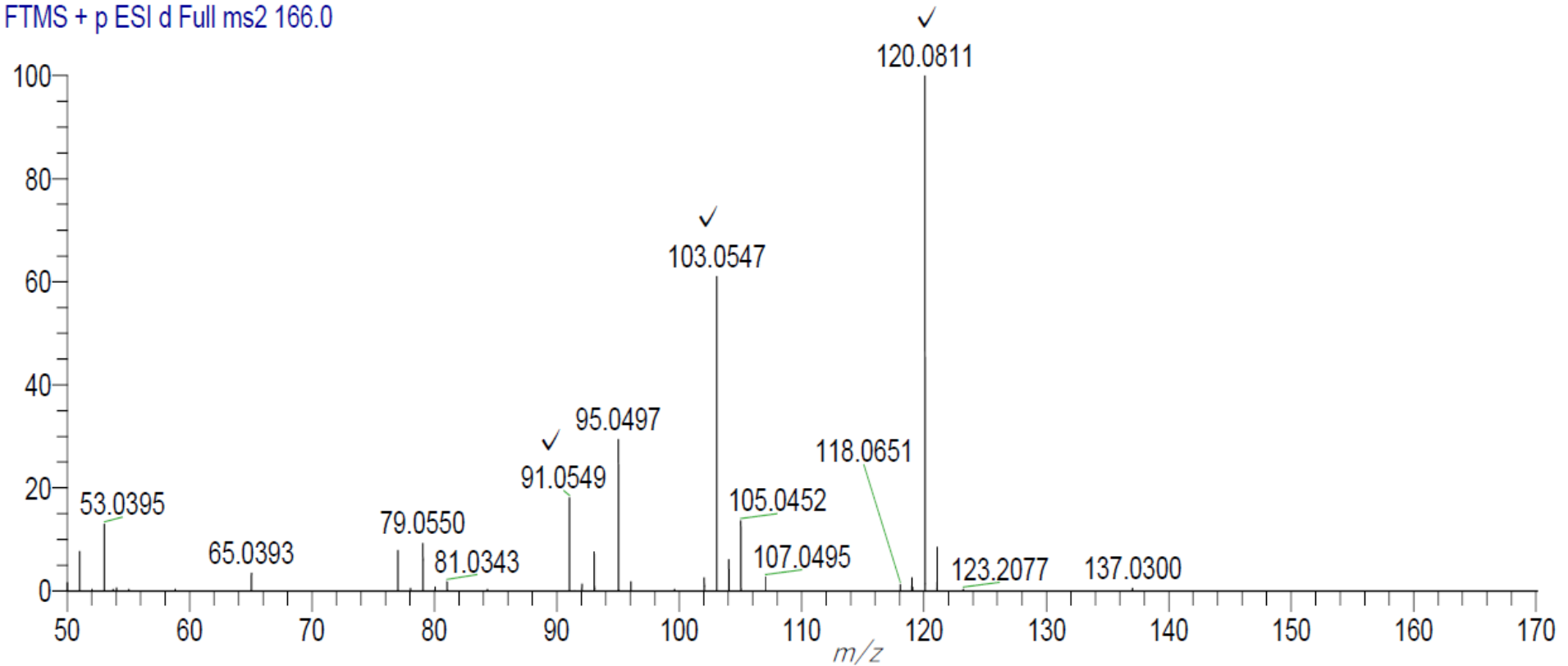
以下の図は、正イオンESIで得られた天然物試料成分のマススペクトルです。  
✓のついたイオンの種類（ $[M+H]^+$ など）を帰属してください。



## 事前課題2

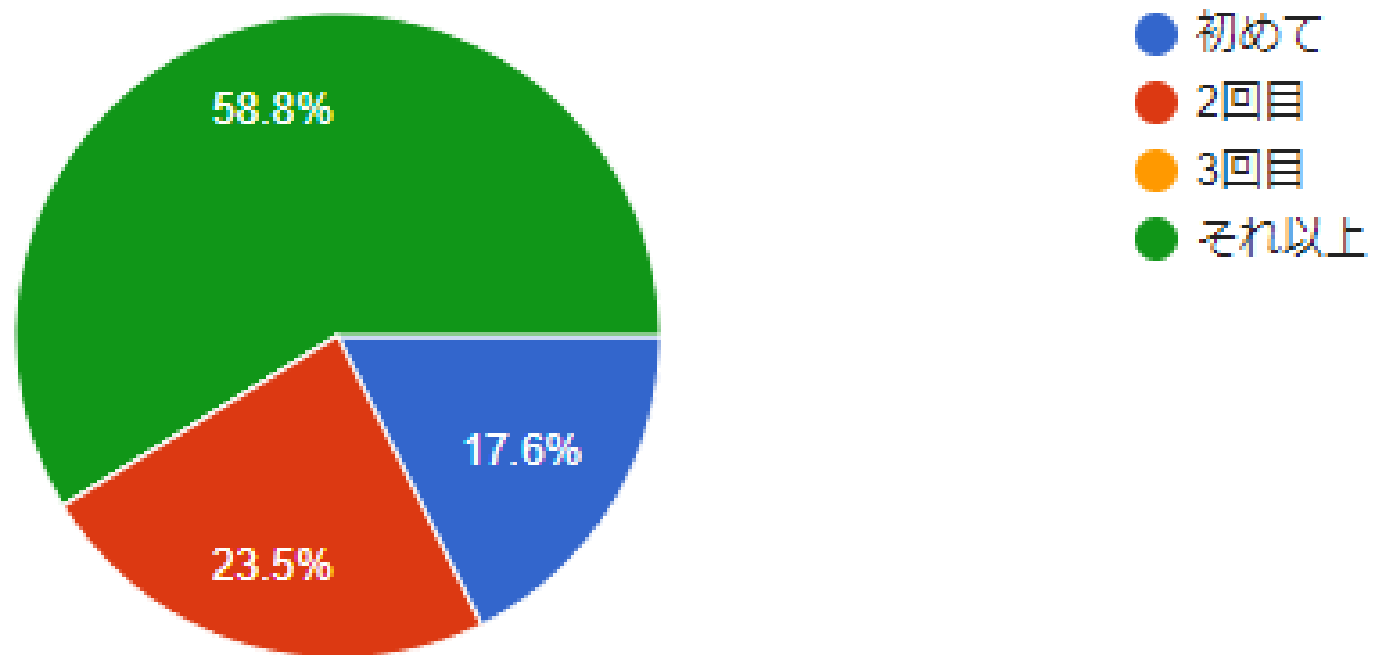
以下の図は、正イオンESIで得られたフェニルアラニンの[M+H]<sup>+</sup>をプリカーサーとしたプロダクトイオンスペクトルです。  
✓のついたプロダクトイオンを構造に対して帰属してください。

20180307\_AminoAcids\_Switch\_CE20-35-50\_01 #21 RT: 0.12 AV: 1 NL: 6.31E7  
T: FTMS + p ESI d Full ms2 166.0



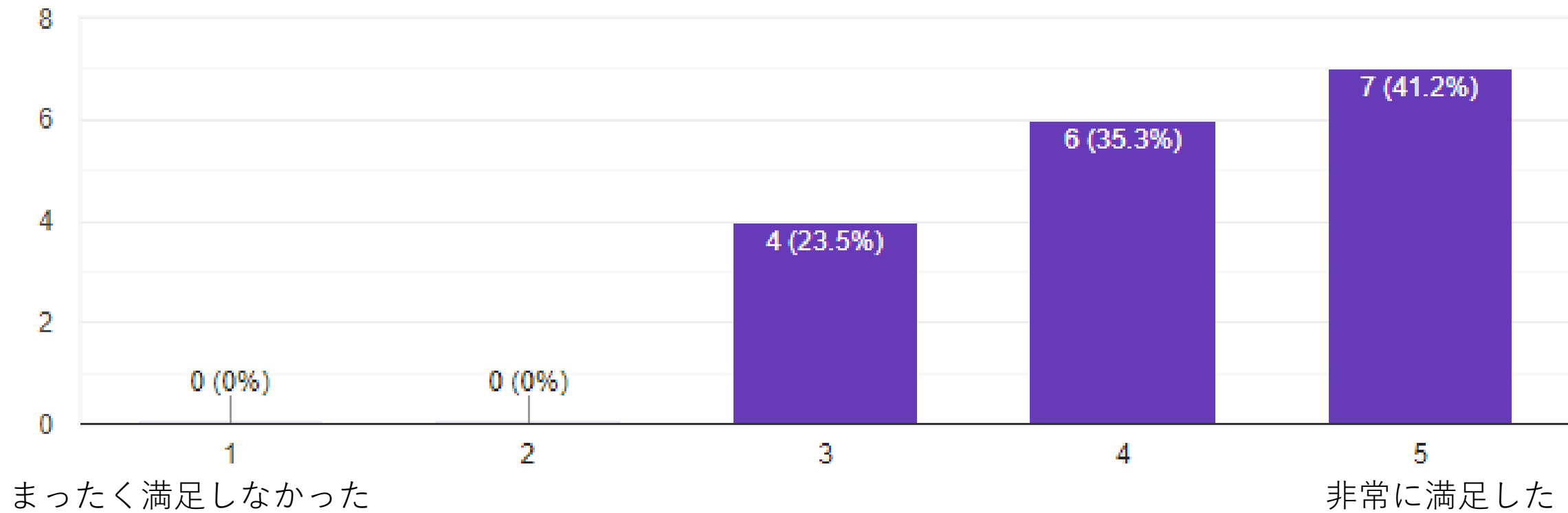
# 設備ネット 質量分析講習会への参加は初めてですか？

17 件の回答



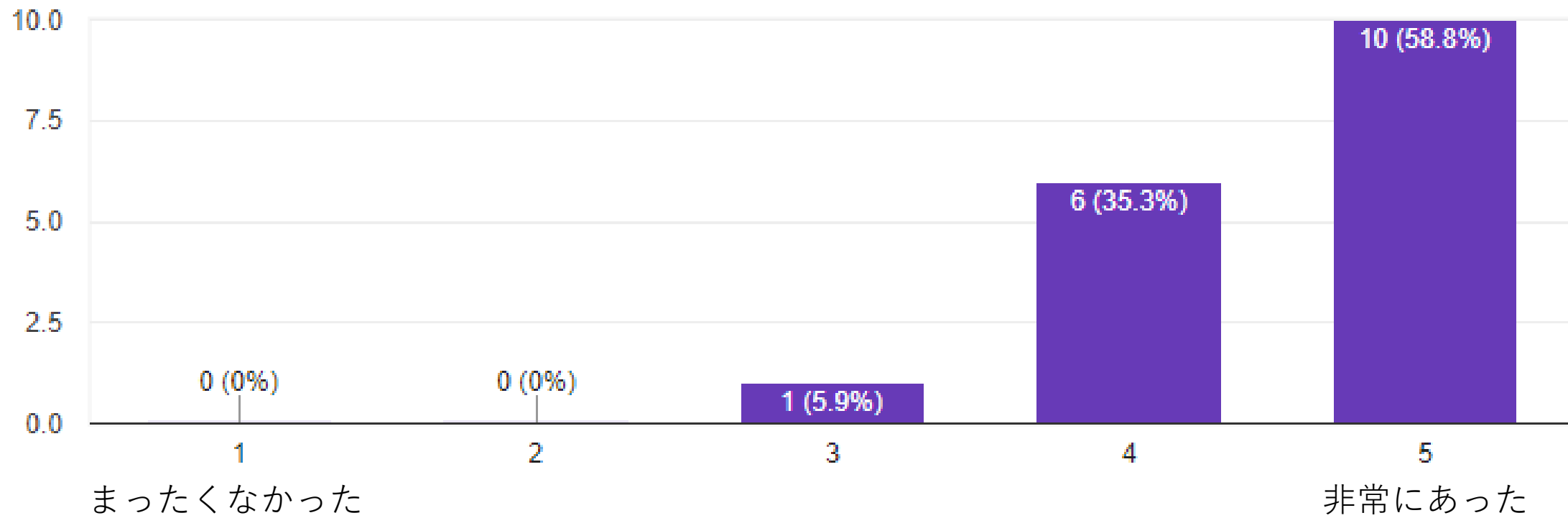
セミナーにはどのくらい満足されましたか。

17件の回答

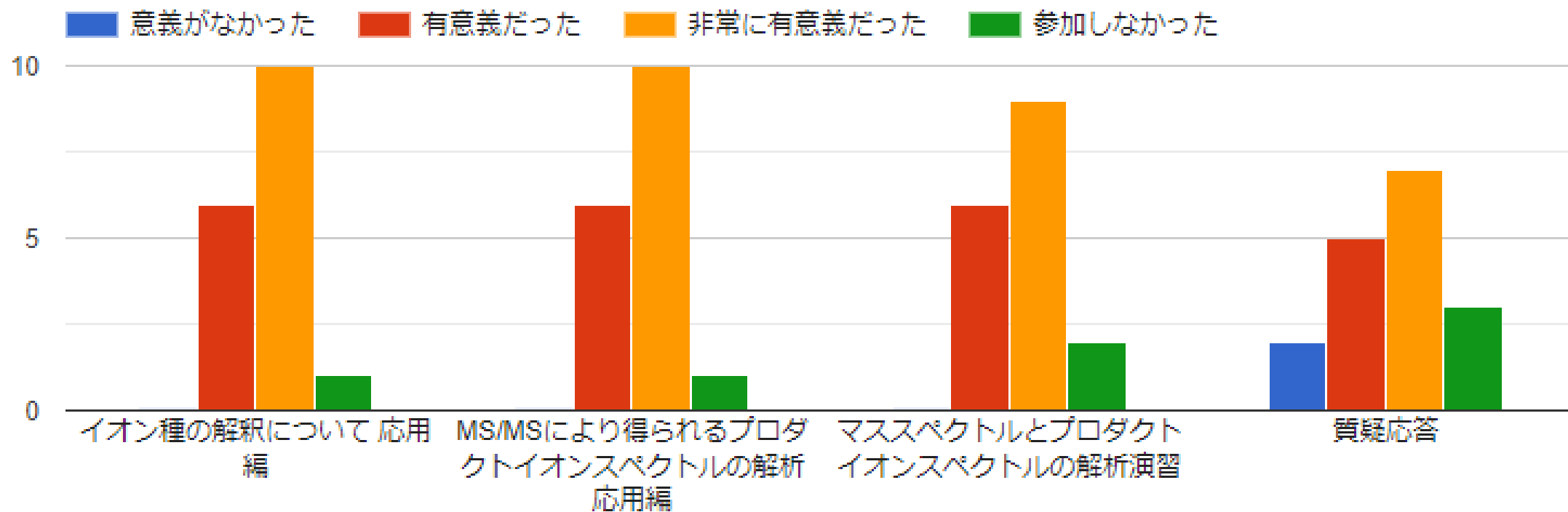


ご自分の仕事との関連性や、仕事に役立つ部分がありましたか。

17件の回答



セミナーの各セッションは、どのくらい有意義だと感じましたか。





質問があればご記入ください。可能な限りフィードバックします。

- 宿題の化合物で脱水ピークが見えておりました。あの化合物で脱水を抑えて測定したい意図を持った場合、パラメータの選択・調整で脱水を回避したり、軽減したりできるのか気になりました。既に頑張って軽減した結果が宿題のスペクトルなのか、逆に脱水ばかりになるようなコンディションも可能なのか、そんなところも気になりました。  
宿題のマススペクトル、 $m/z$ 323はチェックマークはついていなかったけれどアセトニトリルとアンモニアの付加でしょうか。
- 脱水のピークを抑える方法としては主に二つあると思います。  
1つは、In-source CIDを抑える条件にする事、具体的にはCone (Watersの場合)電圧を下げる事です。もう1つは、脱溶媒温度を下げる事です。  
今回は、どちらも特に気にせず、一般的な条件で得られたデータになります。  
ご質問の $m/z$  323イオンについては、EICを作成したら他のイオンとぴったり一致しましたし、理論値にも合いますので、 $[M+NH_4+CAN]^+$ で間違いないと思います。  
ただ、ESIでこのイオンが出るのは結構稀だと思います。

## このセミナーの感想をご自由にお書きください(1/3)

- いつも有意義な講習をありがとうございます。  
普段、酵素消化物をESIにかけてMascot解析をしているので、化合物の解析は経験がなく、ピークの差から考えていく方法に慣れてきたところです。
- ある程度の経験を持っている技術者には非常に素晴らしいセミナーですが、基礎と銘打ってある割にはかなり難しいと思います。スペクトルの紹介もかなり珍しい例が多く、初心者が求めるであろう「一般的な・よくある」ものとはズレを感じます。そろそろ初級・中級・上級の区別をつけたほうが良い気がしてきました。個人的に本セミナーは中級から上級に属すると感じています。これから学ぶ方々のためにもご検討いただければ幸いです。
- 内容は良かったが、実際自分が解析するには難しいと思った。
- 今回はデモンストレータ的な人に問題を解いてもらった感がありますが、初心で苦手な人にはプレッシャかなとも思いました。
- 解析されたMSMSスペクトルの解説を聞く機会がなかなかないので大変参考になりました。理解できていない箇所も多いので動画配信は大変ありがたいです。復習させていただきます。
- 期限の差し迫った仕事が入ってしまい、気がついたときには講習残り30分となってました。本当に本当に残念です。来年も同様に講習会を開催して欲しいです。

このセミナーの感想をご自由にお書きください。(2/3)

- 主催者スタッフの皆様、講師の高橋豊さん、ご準備・運営・開催と有難うございました。初めてセミナーに参加させていただき、有難うございました。

オンラインでこのような情報にアクセスできることが大変有難いと思いました。

組成推定のサイトや、ソフトの紹介も今後試してみたいと思います。

伊藤が休憩中に別件用事を済ませに行ったら、用事に想定以上の時間がかかってしまい、休憩の後もしばらく席を外したままでした。

講習後に西川さんとのやりとりで、伊藤がそのタイミングに呼ばれていたことを知りまして、本当に申し訳なく思っております。ごめんなさい。

会の最後の方で、メトキシ脱離の話題がございました。手元に構造のメモなど何も残していませんが、チャージから遠い所なのにメトキシが抜けるようなご説明があったように思うのですが、ぱっと見の印象が正しければ、酸素のローンペアも含めた超共役系の大きなパイ系電子雲を持つ化合物(イオン)で、チャージは局在しにくい構造に思えたので、メトキシもチャージから遠い事はないのでは？と感じました。

全般に、「スペクトル」と「化合物の構造」の関係が極力明確になっていると更に良い資料になるのだろうと欲が出ました。その試料・資料を準備することが難しいのはよくわかっておりますが、講習を受けてみると、あのスペクトルを与える構造はどうだったのか、ということと紐づいた説明だと、より説得力のある内容になると感じました。

講習準備を自分でやってみろ！といわれて簡単にできる事ではない事も百も承知で書いておりますので、わがままな要求と自覚しつつ書き続けます。

このセミナーの感想をご自由にお書きください。(3/3)

叶うならば全データについて構造との関係も詳しく知りたいです。

更に更に欲を出せば、キーとなる測定条件も紐づいていると理想的ではないでしょうか。

構造が出せなくても、測定条件ならば開示できるとしたら、それも有効だと思います。

一部解説を聞けなかった伊藤なので、解説済みだったらごめんなさい。

宿題の化合物で脱水ピークが見えておりました。

あの化合物で脱水を抑えて測定したい意図を持った場合、パラメータの選択・調整で脱水を回避したり、軽減したりできるのか気になりました。

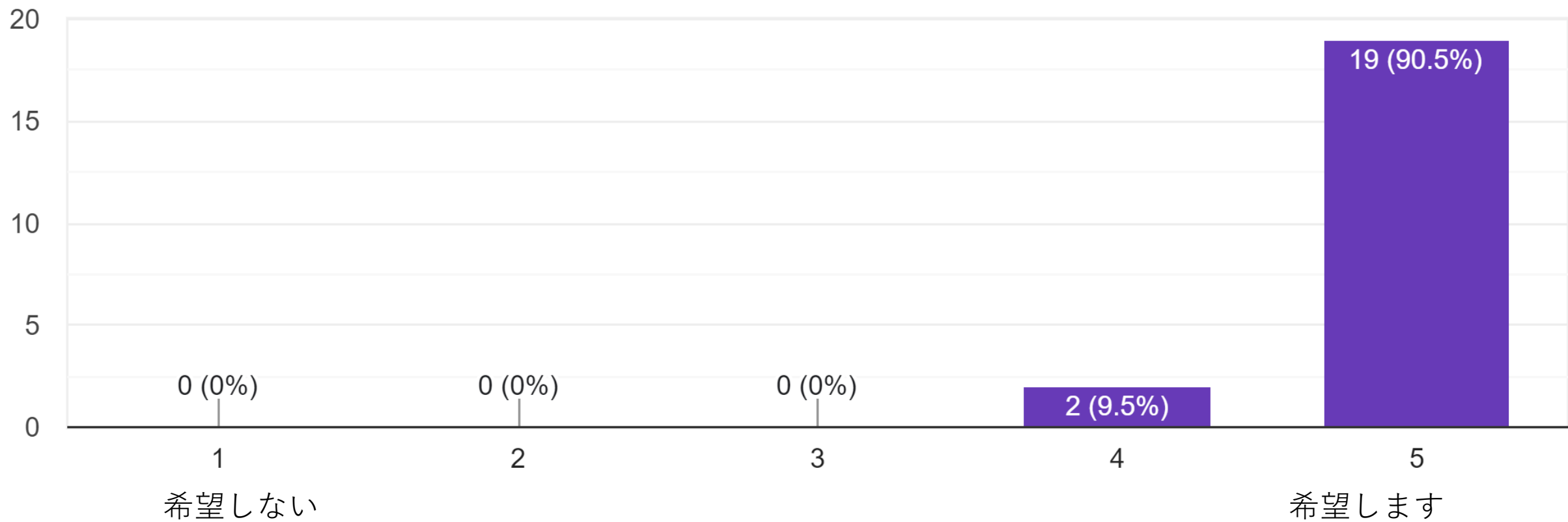
既に頑張っって軽減した結果が宿題のスペクトルなのか、逆に脱水ばかりになるようなコンディションも可能なのか、そんなところも気になりました。

初めて参加させていただき、有難うございました。

今後も楽しみにしておりますので、どうぞ宜しくお願い致します。

今後もこのようなセミナーの開催を希望されますか。

21件の回答



今後企画してほしいセミナー内容やご意見ございましたらご記入ください。

- 細かい装置パラメーターも含めたLCMSメソッド作成の演習のようなもの
- みなさんが実際に測定されたデータで、結果を返却したけれども、実はプロが見るともっといろんなことがわかった！返却の時にこんなコメントもつけたらよかった、というような実例を元にした意見交換会などがあると勉強になると思いますし、自分も先輩にアドバイスをいただきたいと思います。
- 実践をオンラインで見られる講習会

