

MSでは分子の質量でなく
分子から生成したイオンの質量を測定します。
そのため、MSで得られた数値から
元の分子の質量を推定しなければなりません。
精密質量により組成が得られているならば、
イオンの組成式から元の分子式を推定します。

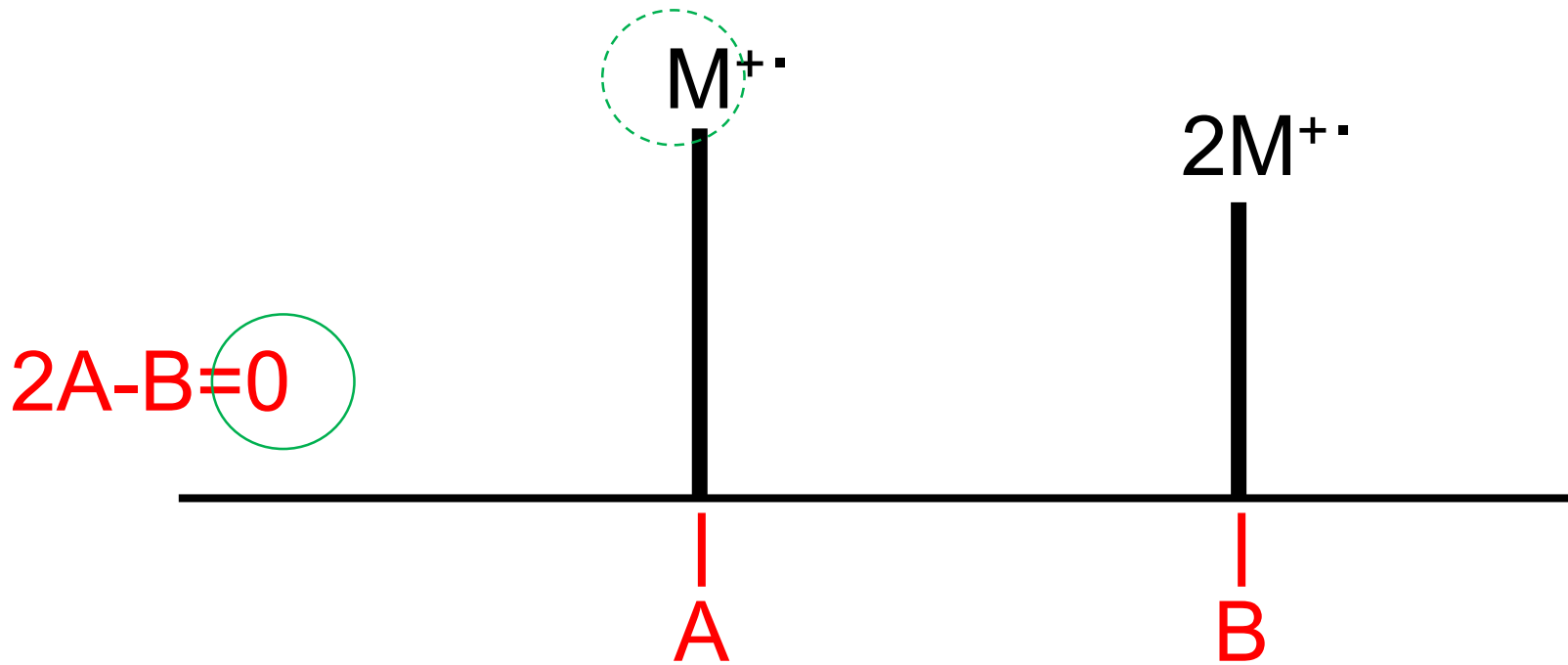
ピークが1本しかない場合は判断材料が無いですが
複数本ある場合はそれらの差から検討できます。

近年のESIはPositiveとNegative両方の測定が
非常に簡単に行えるので、情報を増やすために
どちらも測定しておくことをおすすめします。

ESIのPositiveモードで m/z 118のみが得られた場合
これをプロトン付加と解釈すると元の分子の質量は117、
アンモニウム付加と解釈すると元の分子の質量は100、
ナトリウム付加と解釈すると元の分子の質量は95となります。

精密質量から組成が $C_6H_{16}NO$ と出た場合
これがプロトン付加なら元の分子式は $C_6H_{15}NO$ (US:0)
アンモニウム付加なら元の分子式は $C_6H_{12}O$ (US:1)となり
ナトリウム付加という可能性は除外されます。

FD (Positive)



0.00055

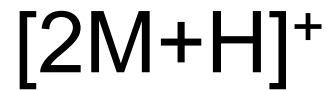
1.0078

22.9898

38.9637

15.9949

FD (Positive)



$$2A - B = 1$$

A

B

0.00055

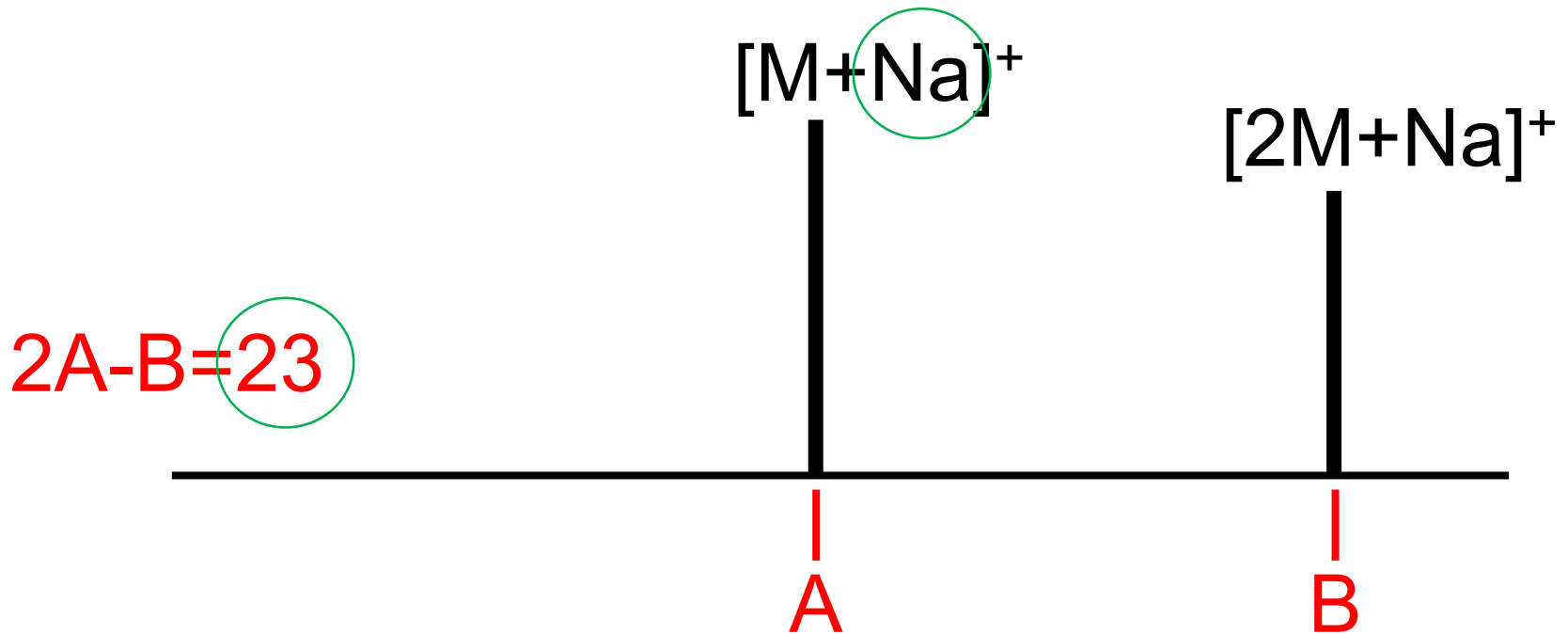
1.0078

22.9898

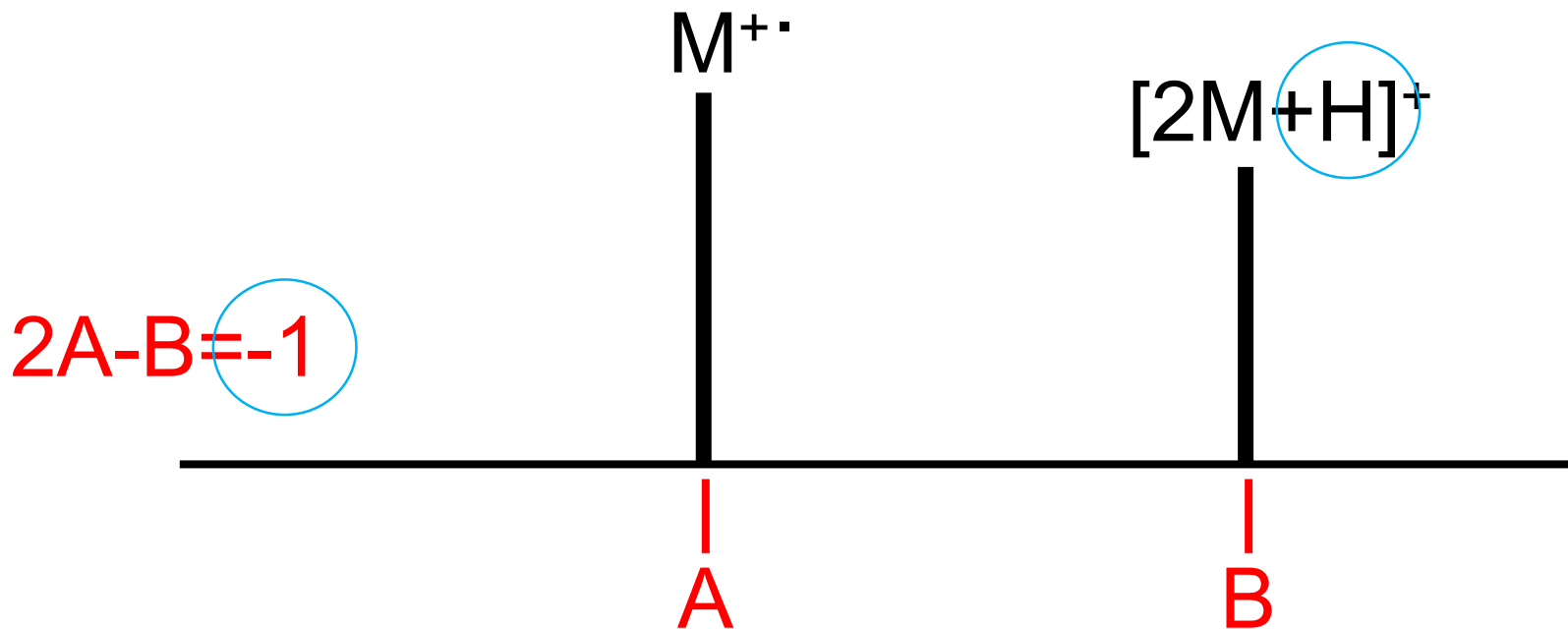
38.9637

15.9949

FD (Positive) 高極性でよくある



FD (Positive) 低極性でよくある



0.00055

1.0078

22.9898

38.9637

15.9949

FD (Positive)

M^{+}

$[2M+Na]^{+}$

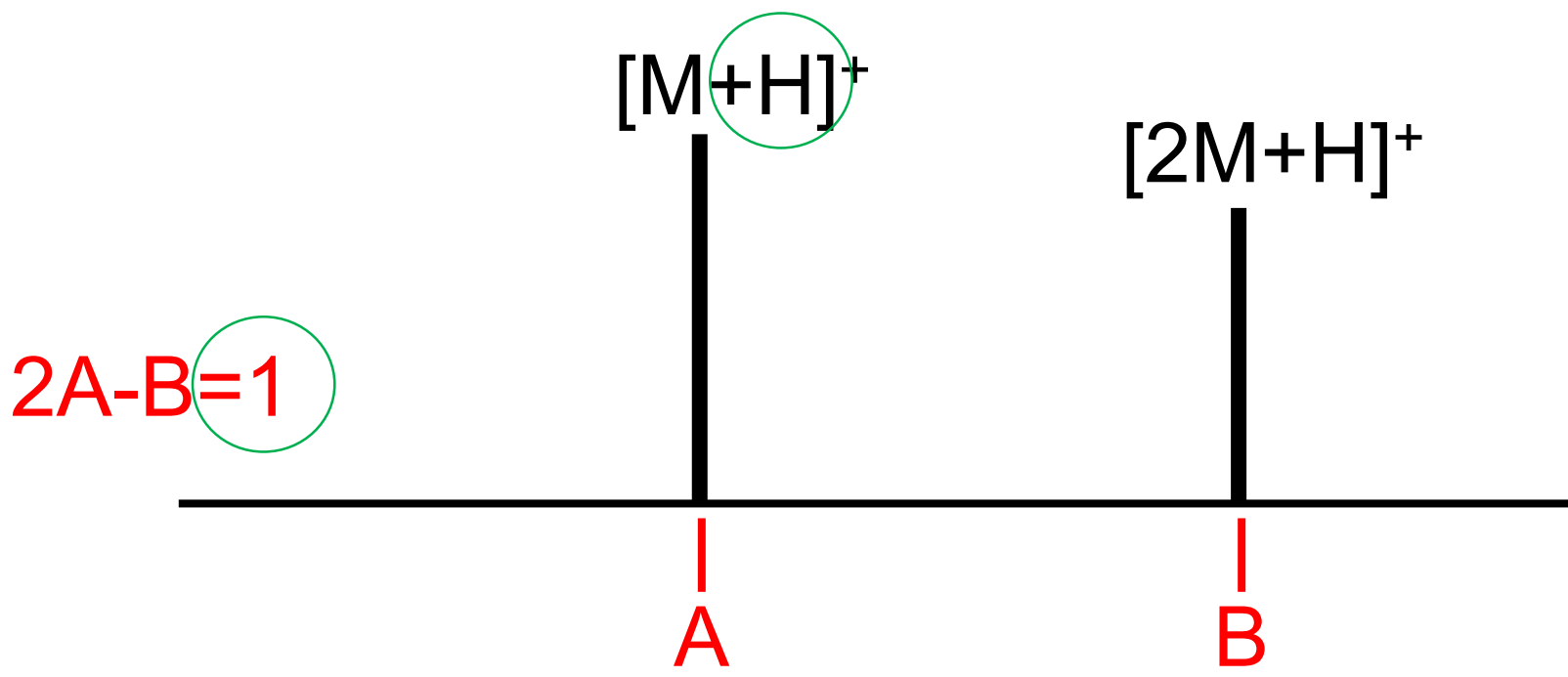
$$2A - B = -23$$



A

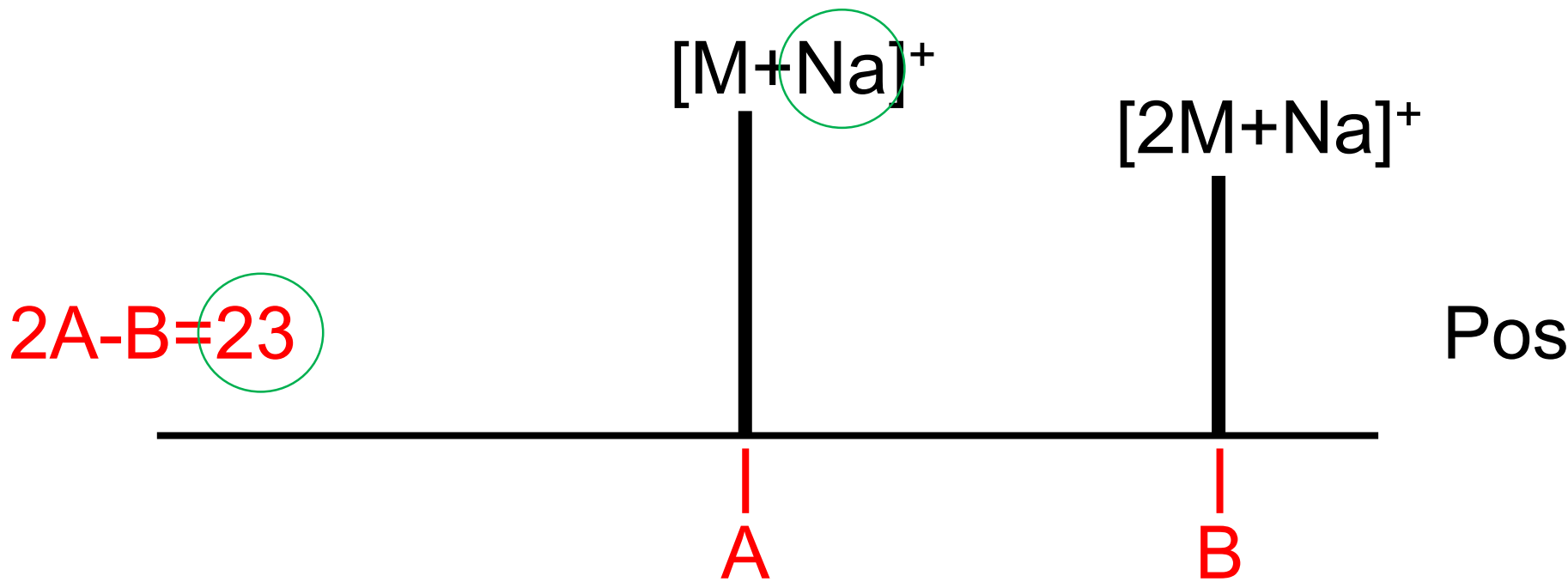
B

ESI (Positive)

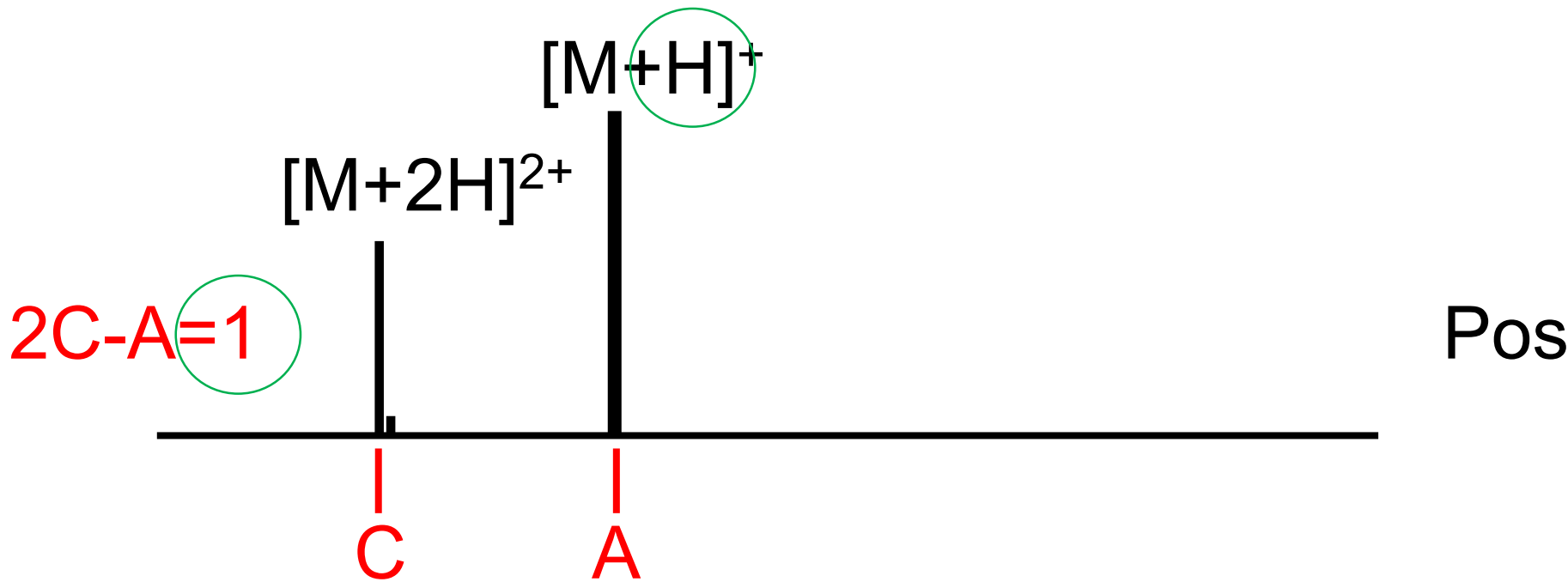


- 0.00055
- 1.0078
- 22.9898
- 38.9637
- 15.9949

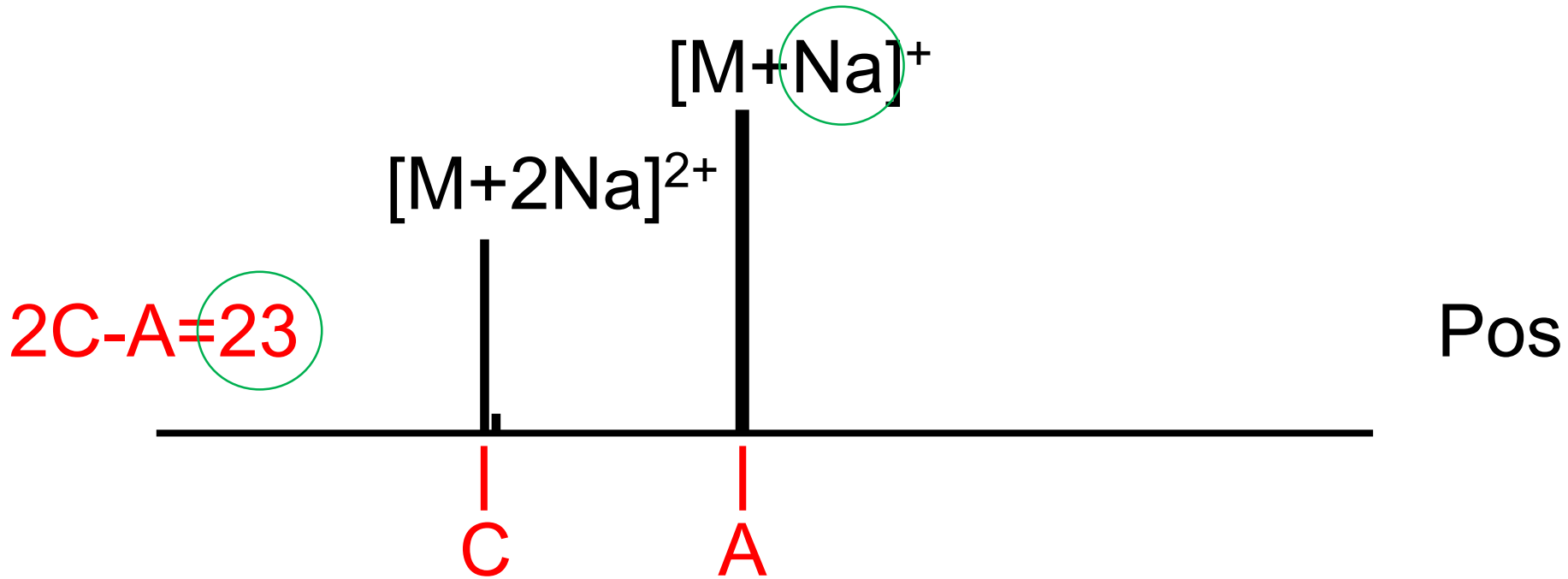
ESI (Positive)



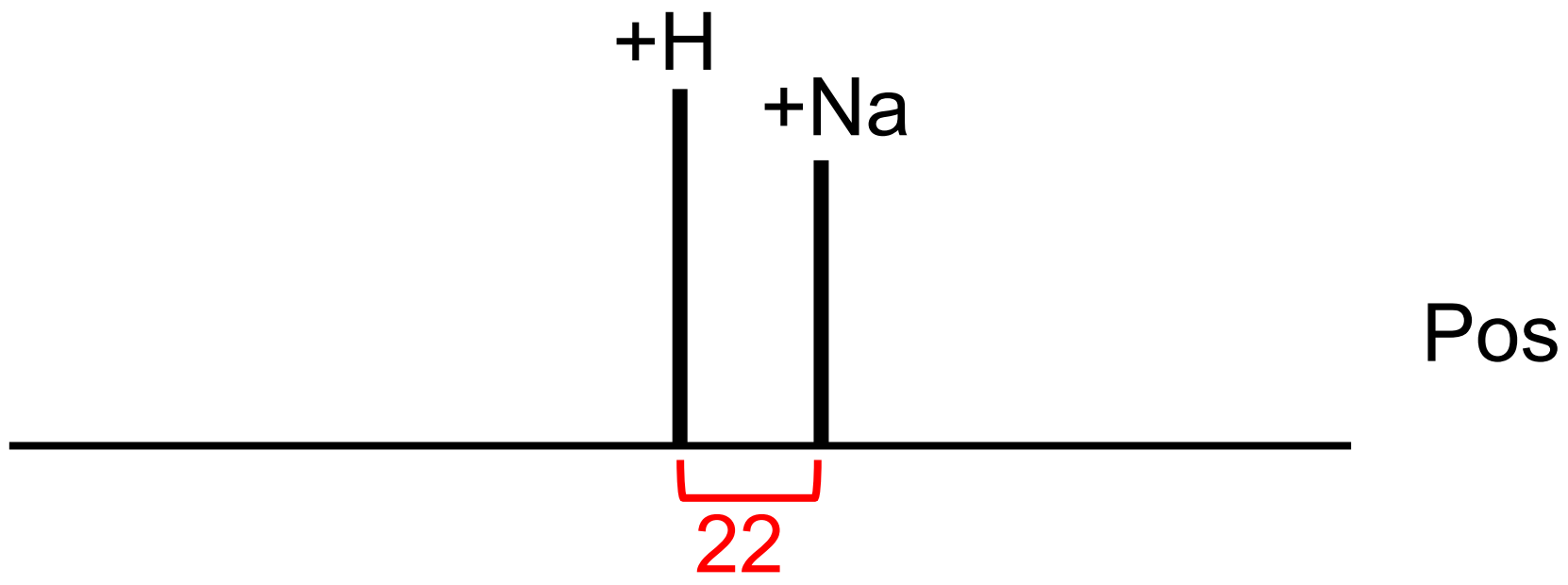
ESI (Positive)



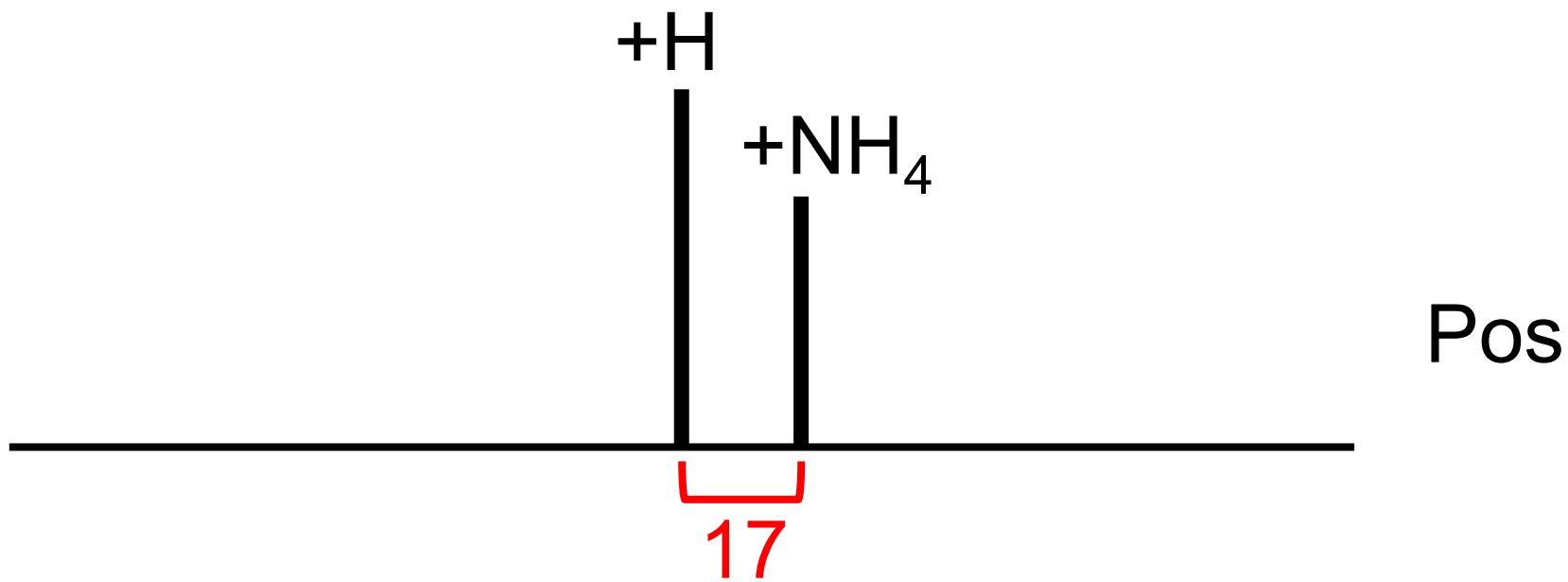
ESI (Positive)



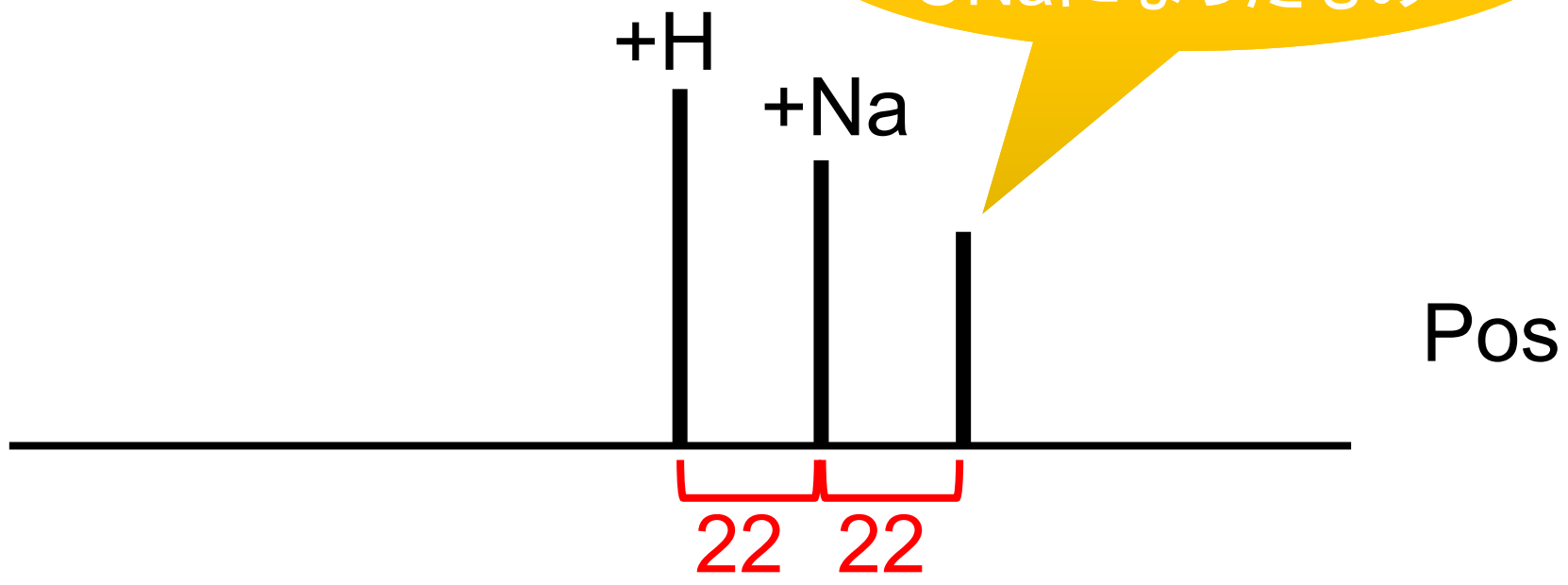
ESI (Positive)



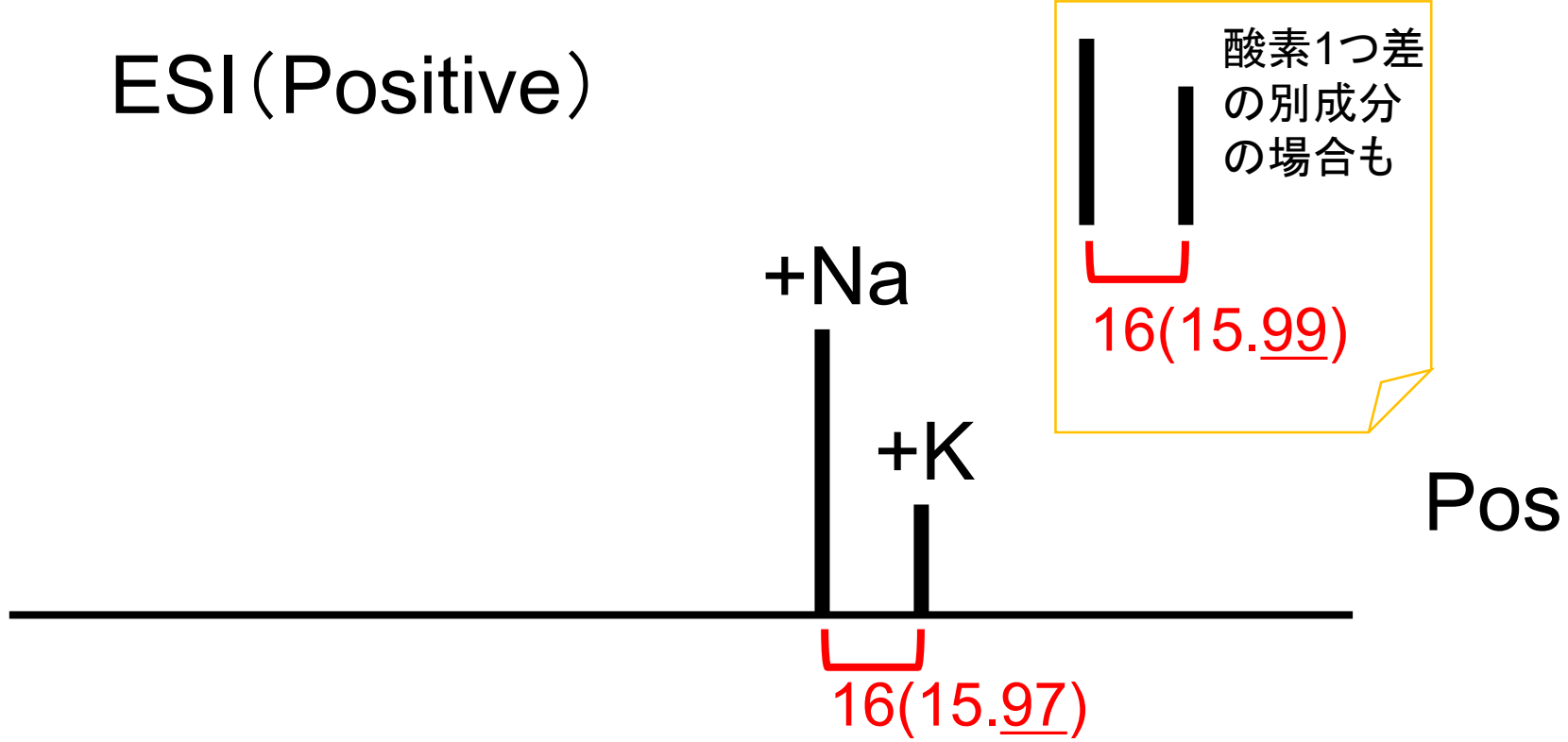
ESI (Positive)



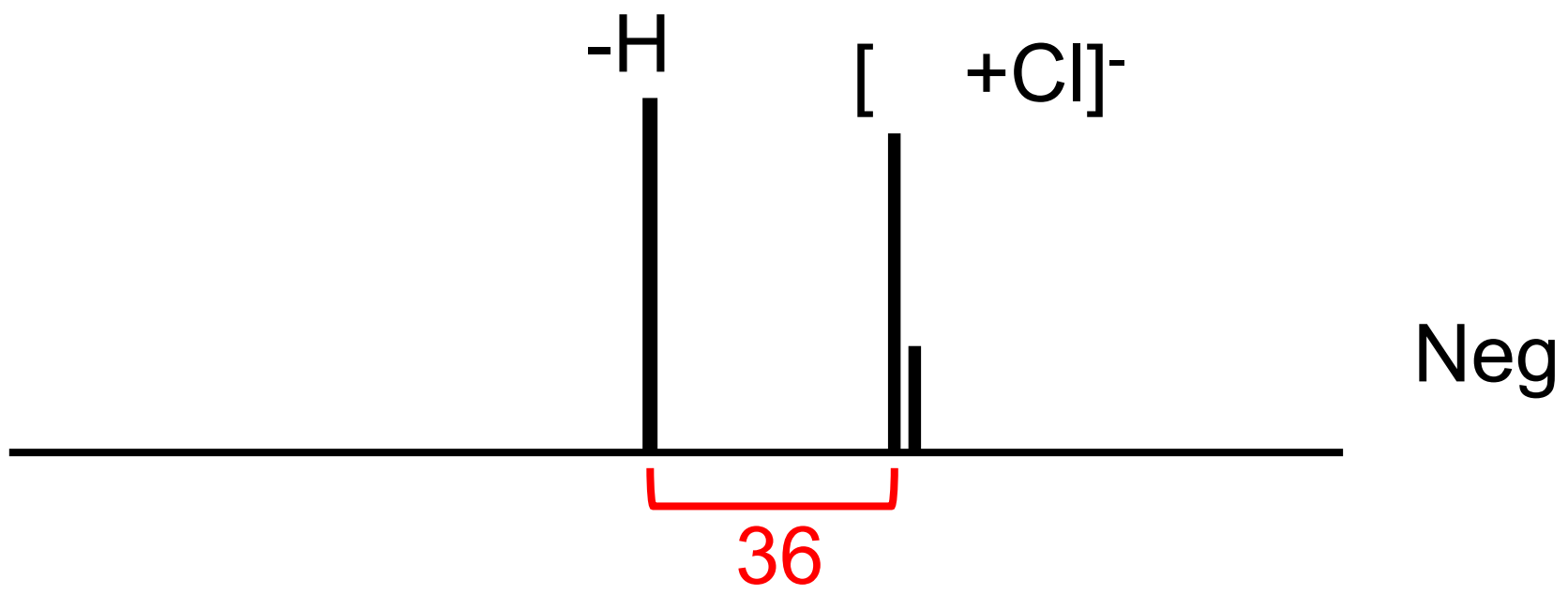
ESI (Positive)



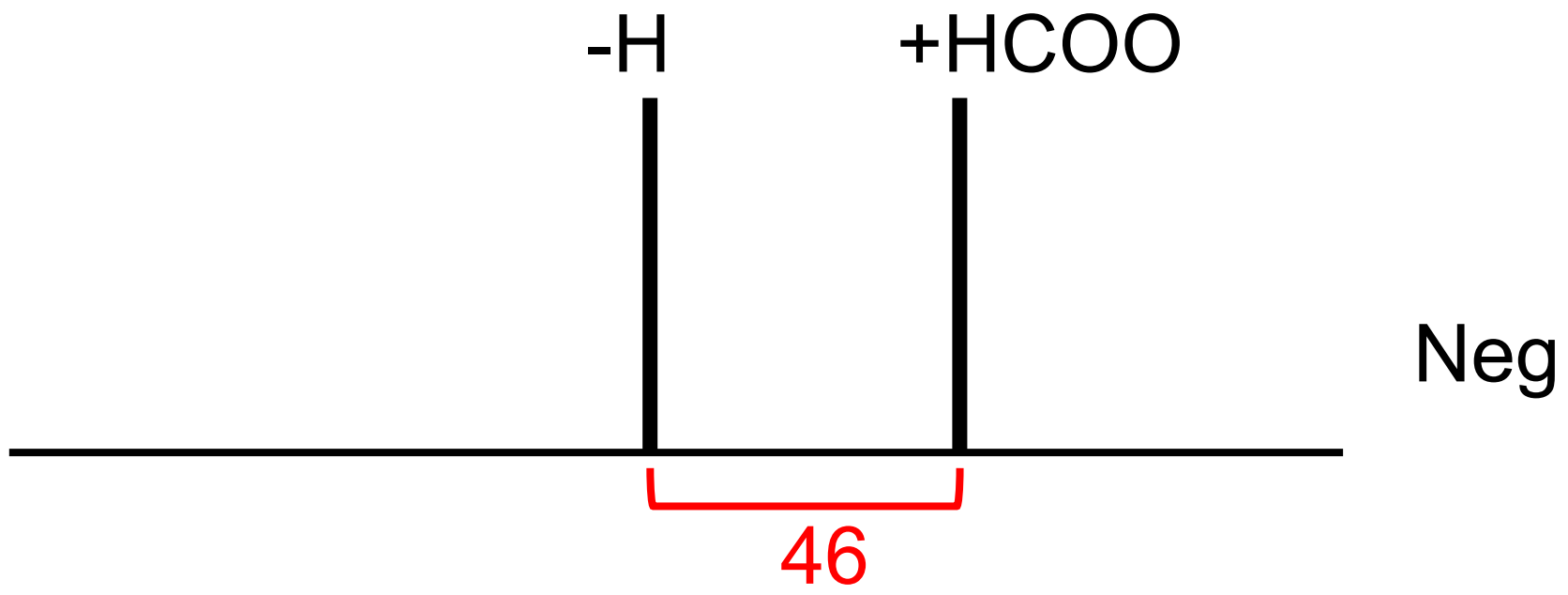
ESI (Positive)



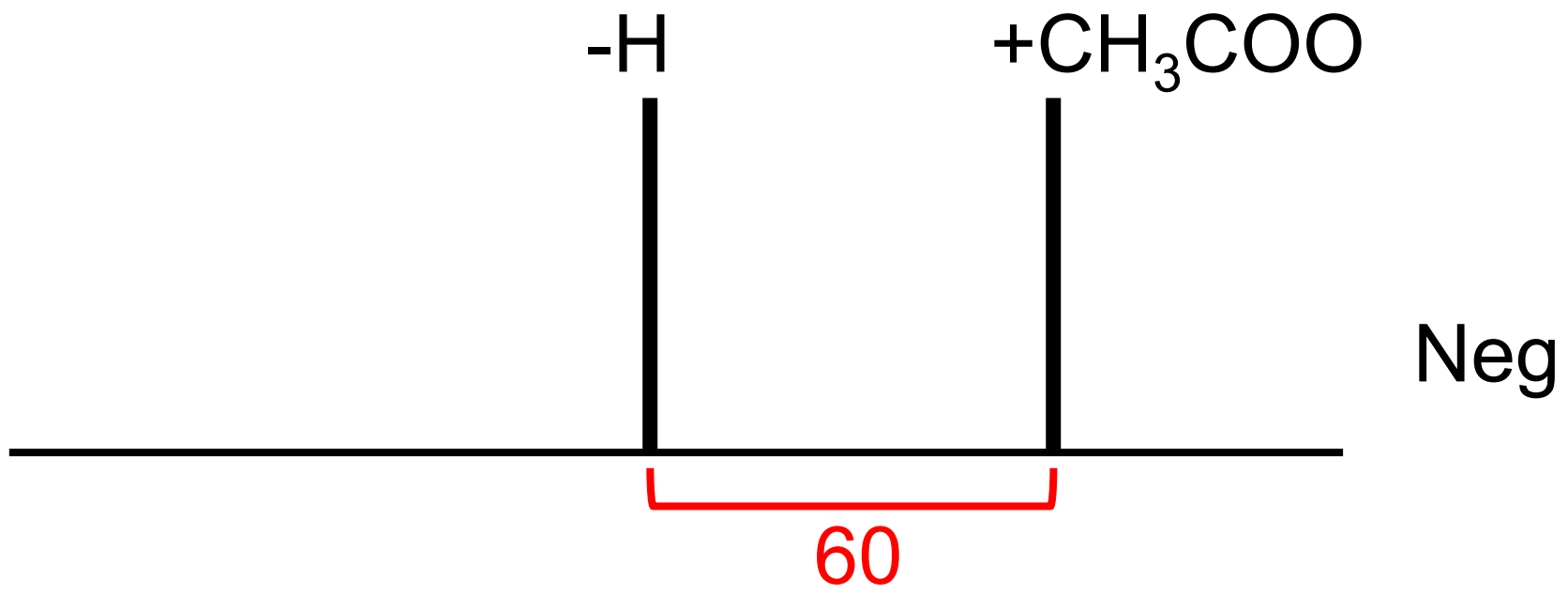
ESI (Negative)



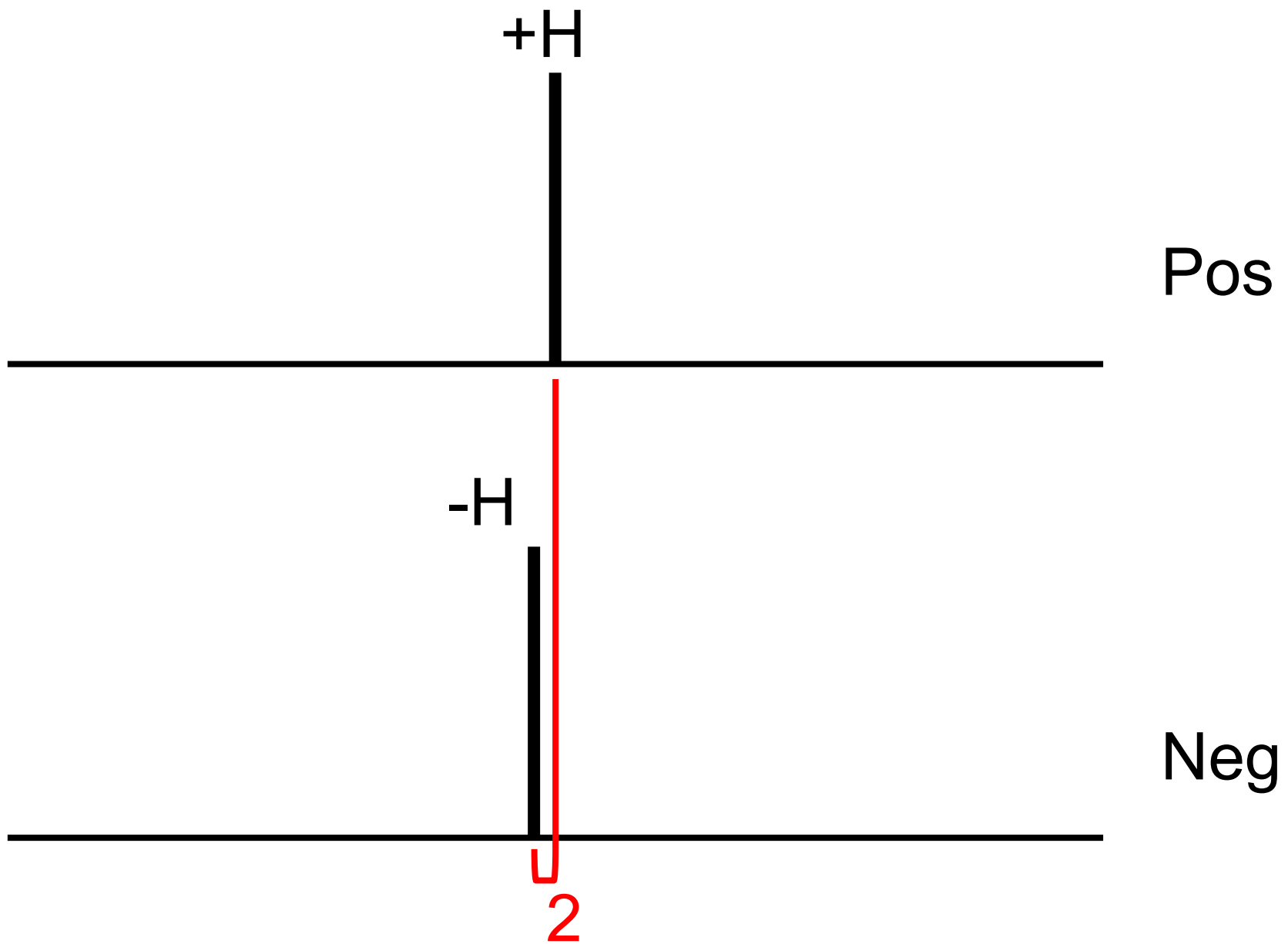
ESI (Negative)



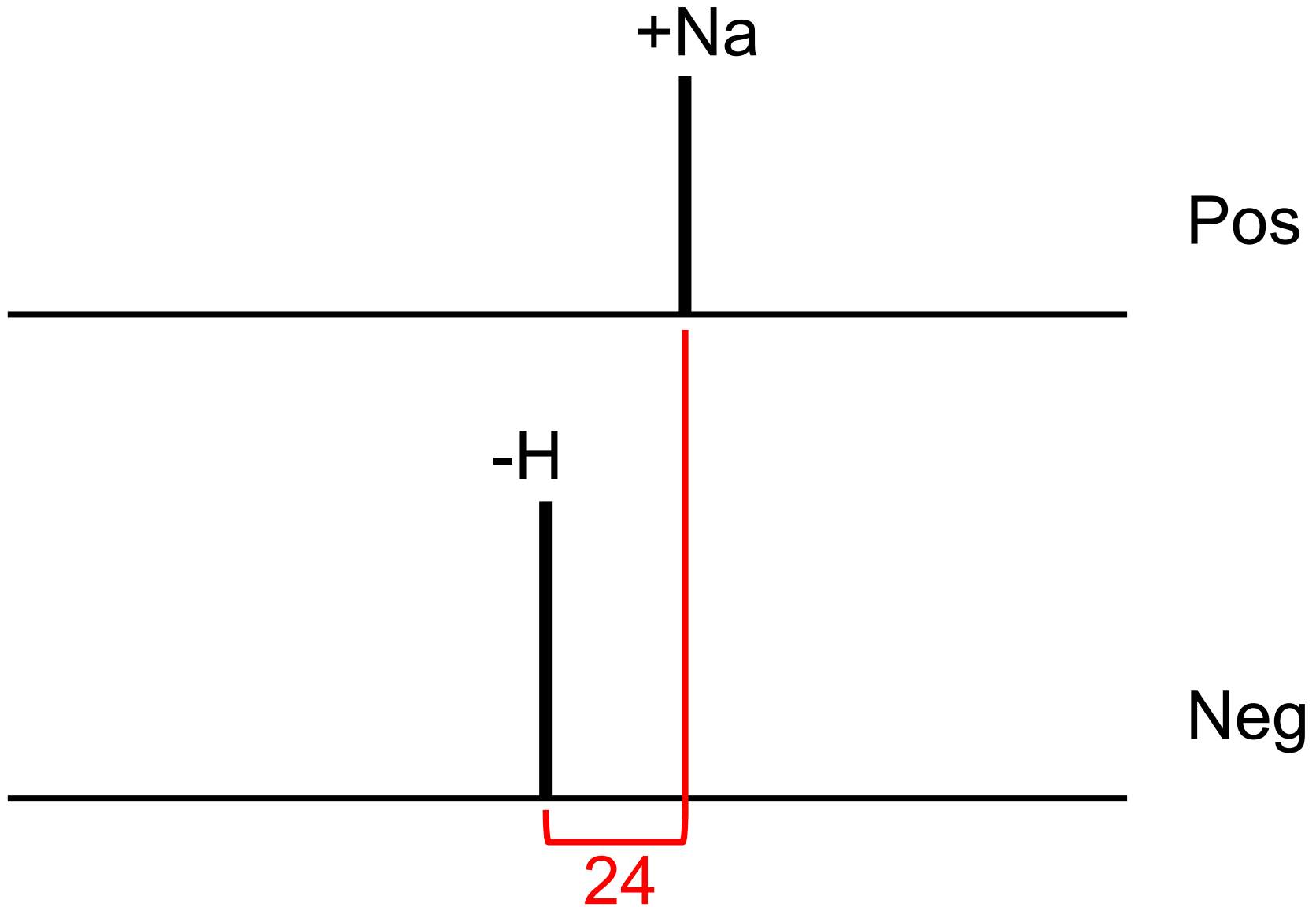
ESI (Negative)



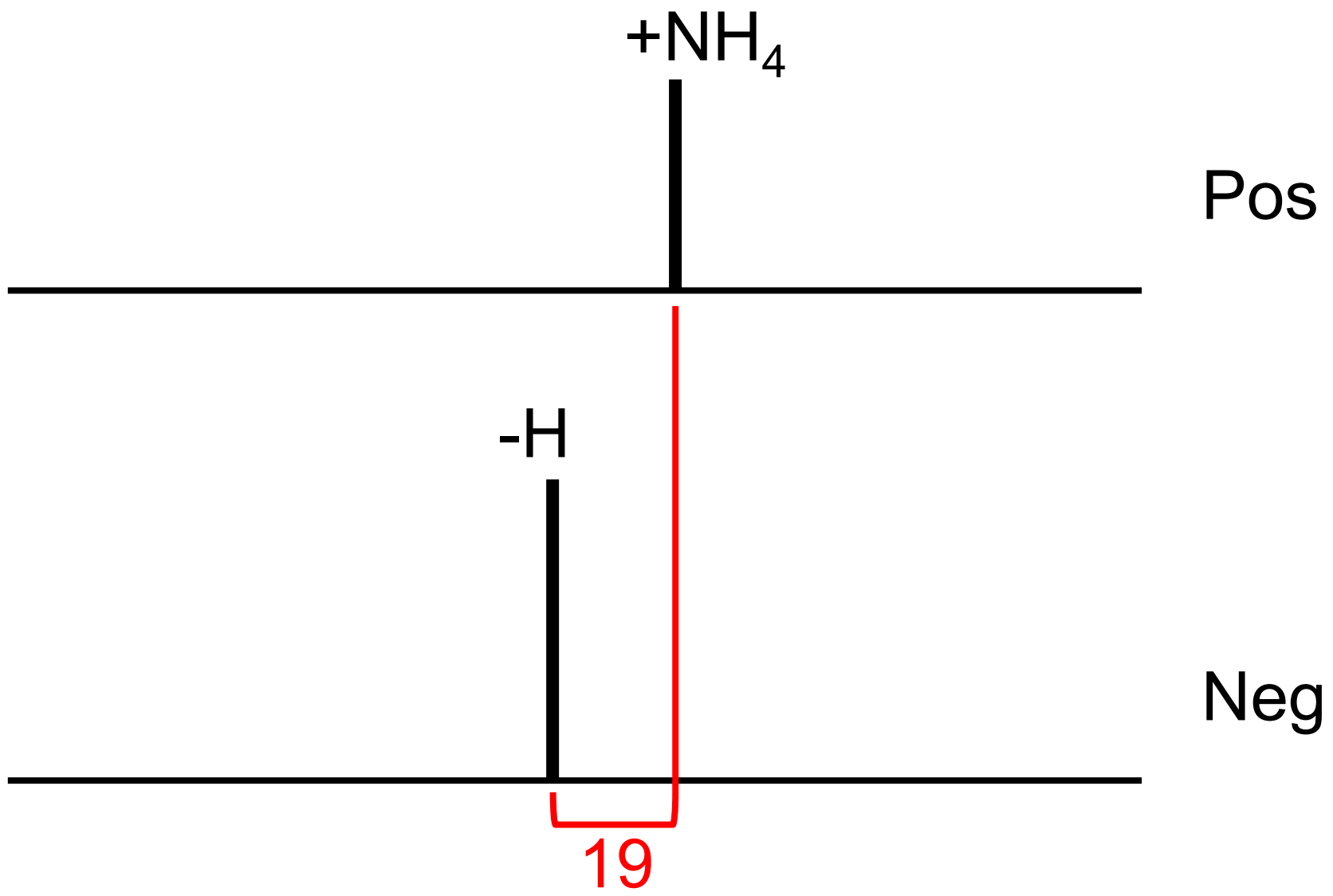
ESI (Positive, Negative)



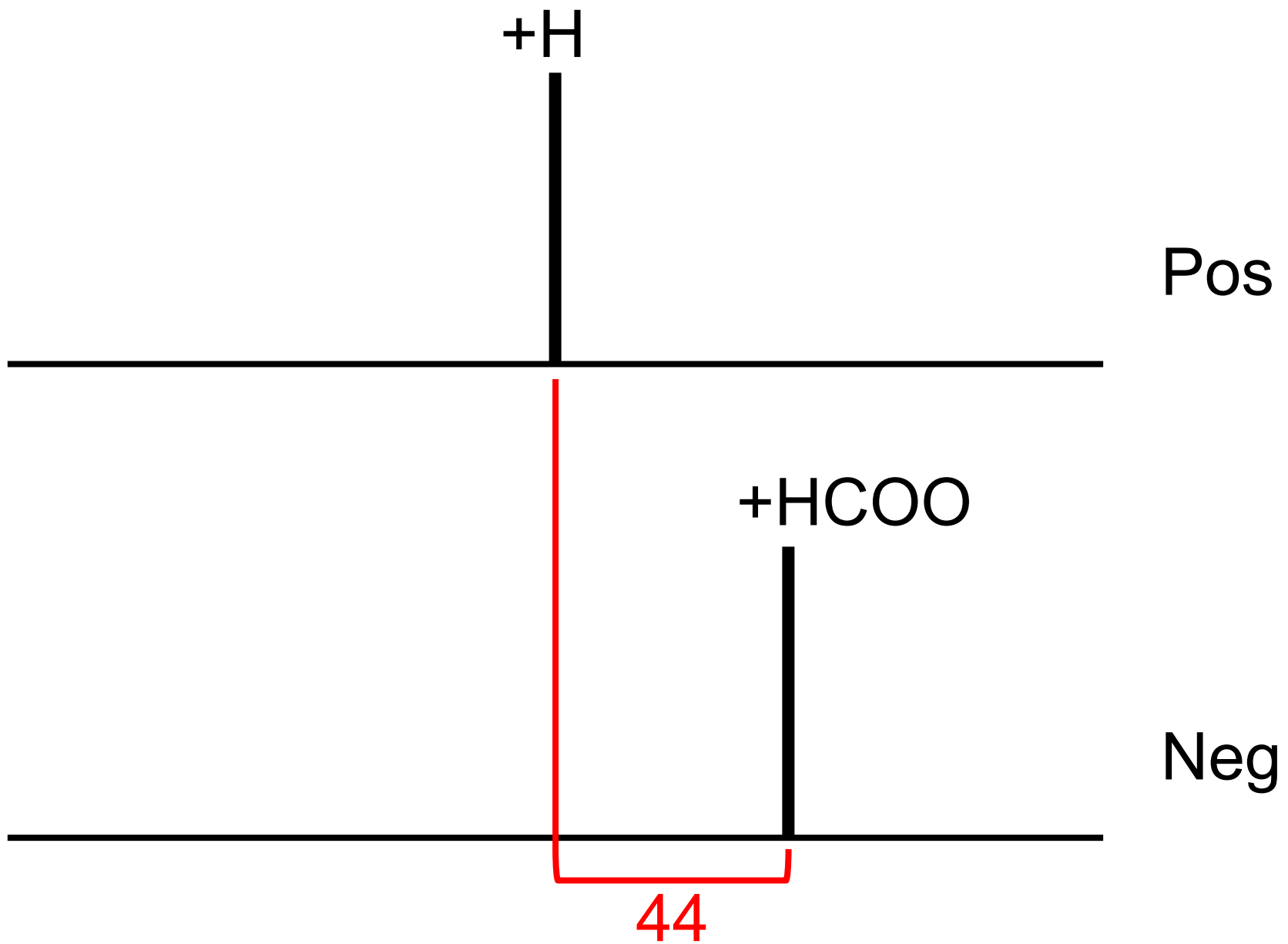
ESI (Positive, Negative)



ESI (Positive, Negative)



ESI (Positive, Negative)



ESI (Positive, Negative)

