

サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社 ランチョンセミナー LS3-6

日時：3月19日（日）12：30～13：20／会場：C-23 会場（京都女子大学 C-502）

**液体クロマトグラフィーを用いた既知・未知天然物の分析ワークフロー
～効率的な分離メソッド開発・見逃しのない検出・質量分析計を用いた構造予測～**

サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社
クロマトグラフィー&MS 事業部 マーケティング部
高原 健太郎

広いラインナップの分析装置を提供しているサーモフィッシャーならではの、特徴的な分析システムを実用例とともにご提案します。

— LC メソッド検討の効率化: Thermo Scientific AppsLab Library (<https://appslab.thermoscientific.com/>)

研究者が測定すべき化合物は多種多様であり、既存の情報を利用した効率のよい分離メソッドの最適化が望まれます。当社ではさまざまな装置（GC、LC、IC、GCMS、LCMS）の分析条件が登録された無料のウェブサイト“AppsLab Library”を提供しており、当社のクロマトグラフィー解析ソフトウェアを用いれば、ダウンロードした分析条件を最少6クリックで測定可能です。一方、適当な分析メソッドがヒットしない場合は、労力少なく分析法を検討できるメソッドスカウティングが有用です。

— 見逃しの回避：荷電化粒子検出器による不揮発性化合物のユニバーサルな検出

測定対象がUV吸収を持つとは限りません。荷電化粒子検出器はUV吸収を持たない、あるいは弱い化合物の検出に活用できます。加えて分子種に関わらず、重量依存の一貫した応答性を示すため、標準物質がなくても相対定量が可能です。装置原理と具体的な天然物測定例を紹介します。

— MSによる構造情報の取得：mzCloud (<https://www.mzCloud.org/>)

効率的な解析のためには、クロマトグラムで得られたピーク成分の化学構造情報をオンラインで取得することが望ましく、検出器としてMSの活用が期待されます。構造解析には、多段階MS解析が可能なイオントラップMSが適しており、部分構造の情報を示すマススペクトルを取得できます。当社では、MS/MSスペクトルを集積した無料のウェブサイト“mzCloud ライブラリ”を提供しており、マススペクトルのマッチングから部分構造推定が可能です。また、分子組成式を正確に決定するには、精密質量が観測できるThermo Scientific Orbitrap 質量分析計が適しています。

本セミナーでは、天然物を分析する研究者の要望に応じて、どのような分析システムを採用あるいは導入すべきかについてご提案します。