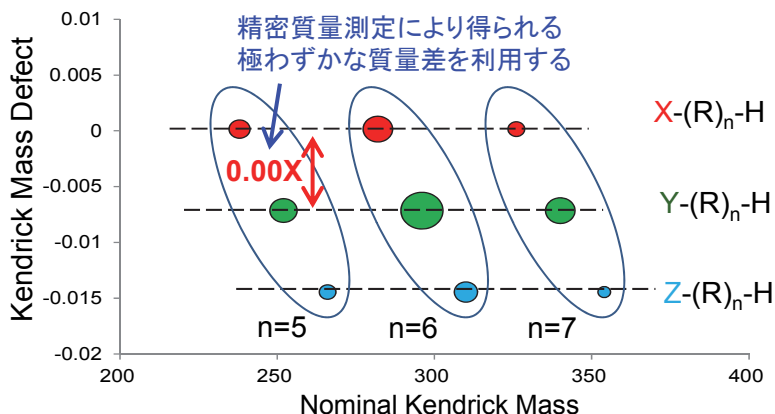


高分解能MALDI-MSによる 界面活性剤の末端構造解析

高分解能MALDI-MSによる精密質量測定およびKMDプロット法を利用することで、界面活性剤混合物について、各成分の末端構造を特定することが可能である。

KMD (Kendrick mass defect) プロット

ある化学組成を有する基準の単位を整数値に設定 (KM) することで、その化学組成とは異なる部位 (末端基など) が存在する場合に生じるずれ (KMD) を利用して視覚的に解析する方法



計算式の一例

繰り返し構造をCH₂とした場合

$$KM = \text{観測された質量} M \times 14.00000 / 14.01565$$

$$KMD = KM \text{の整数値 (NKM)} - KM$$

~繰り返し構造以外の質量をαとすると

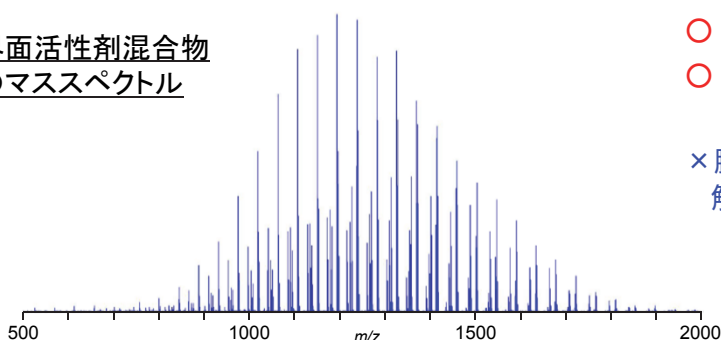
$$KM = 14 \times n + \frac{\alpha \times 14.00000}{14.01565}$$

重合度はKMD
に寄与しない

この部分のみ
KMDに反映される

高分解能MALDI-MSによる界面活性剤混合物の一斉分析

界面活性剤混合物
のマススペクトル



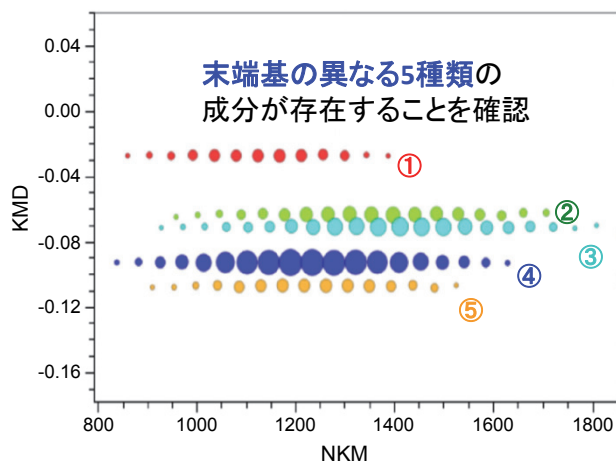
- 精密質量より、組成情報が得られる
- 高分解能測定によって、ピーク分離能が向上

× 膨大な数のピークが観測されるため網羅的な解析が困難

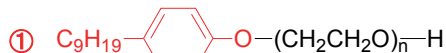


KMD解析が有効！！

KMDプロット



各系統の
MS解析



各系統の界面活性剤の末端基を特定

KMDプロットにより視覚的に解析
⇒ 網羅的に構造特定を行うことが可能に！