

- LC/MSの基礎 -
溶媒の選択

サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社

LC/MSで使用可能な溶媒

LC/MSは分析可能な化合物の極性が広いため、分析目的に合わせて様々な溶媒やバッファーを使用する必要があります。

どのような溶媒を使用することができるのか？



一般的な溶媒の種類

◆代表的な移動相

水、メタノール、アセトニトリル、イソプロパノール、エタノール etc.
(ジクロロメタン、クロロホルム、ヘキサン : APCI)

✓HPLCグレード以上のものを推奨します (不純物の検出を抑える)

◆代表的な添加剤およびバッファー

ギ酸 (通常 : 0.01~0.1%、上限目安 : 1%)

酢酸 (通常 : 0.05~0.5%、上限目安 : 1%)

ギ酸アンモニウム (通常 : 2~10mM、上限目安 : 50mM)

酢酸アンモニウム (通常 : 2~10mM、上限目安 : 50mM)

✓高濃度緩衝液はイオン化を抑制し、感度が低下します

✓不揮発性の無機酸・無機塩 (リン酸、リン酸塩等) は析出し、詰まりの原因となるので使用不可

よくある質問

Q. LC/MSでは以下の溶媒や添加試薬を使用できますか？

- ① トリフルオロ酢酸 (TFA)
- ② テトラヒドロフラン (THF)
- ③ ジメチルスルホキシド (DMSO)



A 全て可能です (ただし、注意が必要です)



基本的にHPLCで使用できる溶媒はほぼ使用可能です。
しかし、MSで使用する場合、感度低下や汚れを引き起こします。
きちんとリスクを理解した上で濃度を注意して使用する事が重要です。

HPLCの溶媒制限	<ul style="list-style-type: none">・ 腐食性がない・ 有機溶媒との混和時に塩が析出しない
MSの溶媒制限	<ul style="list-style-type: none">・ 腐食性がない・ 揮発性の塩を利用する・ イオン化の効率を妨げない・ 装置に吸着しない

トリフルオロ酢酸 (TFA)

- ◆ TFAはペプチド、タンパクの分析において分離を良くするために利用されます（イオンペア効果）。

しかしTFAは電離度が高いため、スプレーのイオン形成を抑制させます。また、Negative ion modeではTFA自身がイオン化されて他の分子のイオン化を抑制するため、使用量を制限する必要があります（最大でも0.1%以下）。

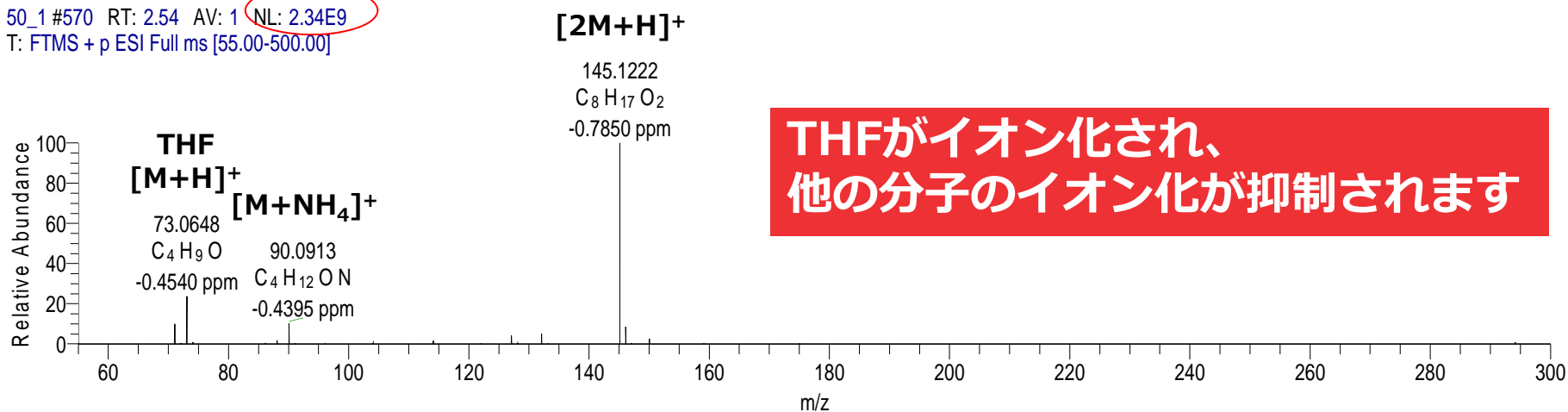
LC/MSでは代替としてギ酸の使用を推奨しています。

テトラヒドロフラン (THF)

- ◆ THFは水と任意に混和する、粘性の低い低極性溶媒です。逆相系の分析において溶出力が高く、圧も上がらないため広く用いられています。しかし、MSでは高濃度で使用するとTHF由来のイオンが非常に強く検出され、他の分子のイオン化を抑制します。使用する場合は安定化剤不含のものを利用し、量を加減する必要があります。
- ◆ THFは溶出力が強いため、順相用の仕様に変更することをお勧めします。

ESI positive

50_1 #570 RT: 2.54 AV: 1 NL: 2.34E9
T: FTMS + p ESI Full ms [55.00-500.00]



**THFがイオン化され、
他の分子のイオン化が抑制されます**

その他の注意が必要な溶媒

- **ジメチルスルホキシド(DMSO)**

低濃度であれば移動相にも使用可能です。Negative ion modeのバックグラウンドイオンが非常に高くなり、分析対象の感度を低下させます。

DMSOを用いた分析後は十分に洗浄してから分析を行う必要があります。

- **各種イオンペア試薬**

HPLCで使用されているイオンペア試薬の多くは不揮発性であるため、LC/MS用のもの(揮発性)を選択する必要があります。LC/MS用であっても、試薬自体がイオン化されて強く検出し、感度にも影響を与えることが多いです。

使用後にラインに残るものも多いため、注意が必要です。

- **界面活性剤**

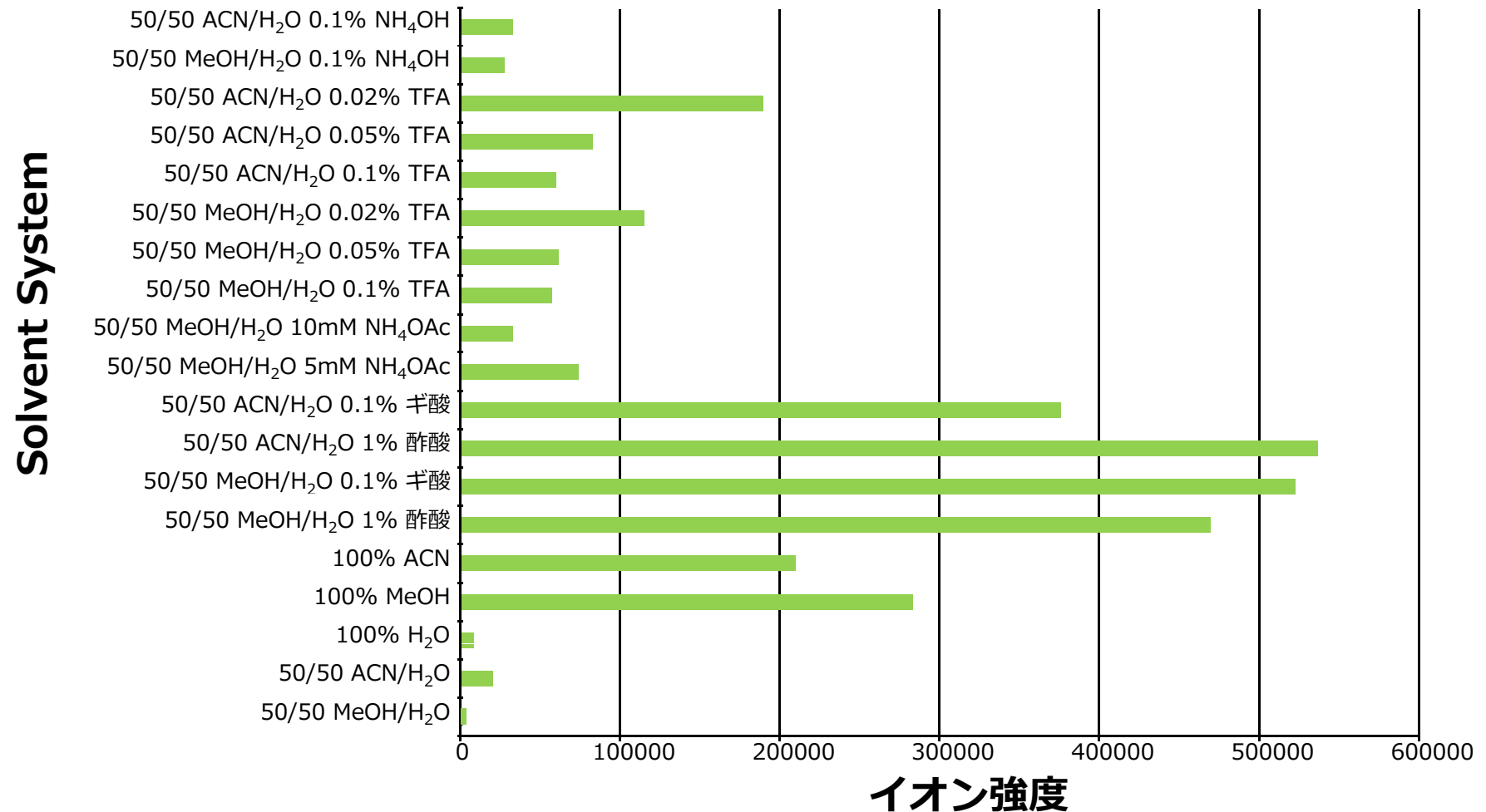
タンパク抽出や器具洗浄で使用しますが、感度を低下させる要因となります。タンパク抽出で使用しなければいけない場合、専用のアフィニティーカラムで除去します。

また、LC/MS用器具は基本的に界面活性剤を用いて洗浄しないことを推奨します。

移動相組成や添加剤による効果

ESI positive ion mode

化合物：Leu-Enkephalin (Tyr-Gly-Gly-Phe-Leu)



コンタミネーションへの配慮

UV検出器で検出されないようなコンタミネーションもMSでは検出されるため、条件設定やメンテナンスなどで注意が必要となります。

例：カラムのpH範囲限界付近での分析 (Negative ion mode)

