



合成化合物的质谱信息的确认

Chromaster5610 质谱检测器与大型质谱分析仪 (Mass Spectrometer) 不一样，它是为了 LC 用户推出的新概念质谱检测器 (MS Detector)。使用注射泵将样品溶液直接导入质谱检测器，就可以简便的获得质谱信息，从而就可以做合成化合物的质谱信息的确认，或是在探讨合成条件之际的化合物确认的简单监控。



5610质谱检测器

合成化合物中间体的注入物检测 (1)

■ 分析条件

表1 分析条件

离子化法	ESI
离子化模式	Positive
离子化电压	2200 V
检测模式	Scan
气体流速	0.5 L / min
IS / AIF 温度	70 °C / 120 °C
泵流速	2 μL / min

■ 样品调制

浓度：各 10 $\mu\text{g/mL}$ 溶剂：CH₃OH

■ 分析方法

把注射泵与质谱检测器连接，直接注入样品溶液。

图2 注射泵外观
(YMC 公司产 YSP-101)

■ 综合合成方案1 (Synthesis of Diol)

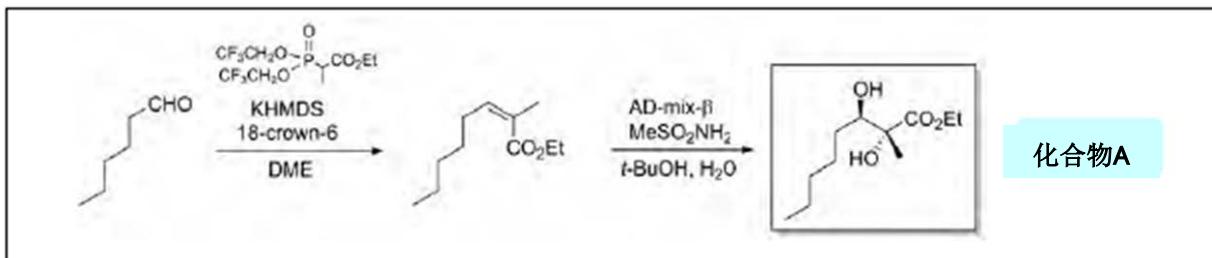


图2 综合合成方案1

■ 生成物的结构式和质谱谱图

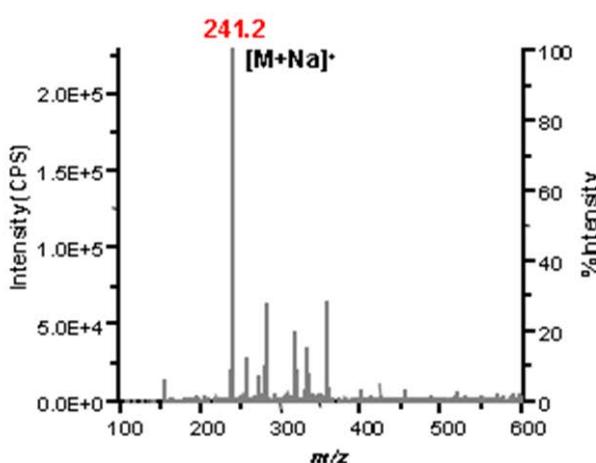
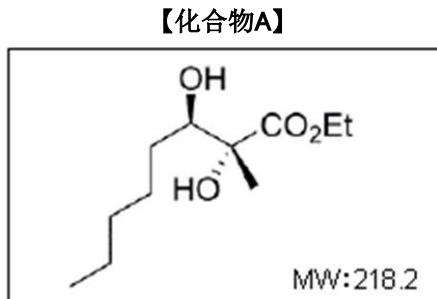
把化合物 A 用甲醇做稀释为 10 $\mu\text{g/mL}$ ，直接注入质谱检测器检测，观察了钠加合离子。

图2 口服糖尿病治疗药的结构式和质谱谱图



合成化合物中间体的注入物检测（2）

■ 综合合成方案2 (Synthesis of Dihydropyran Derivative)

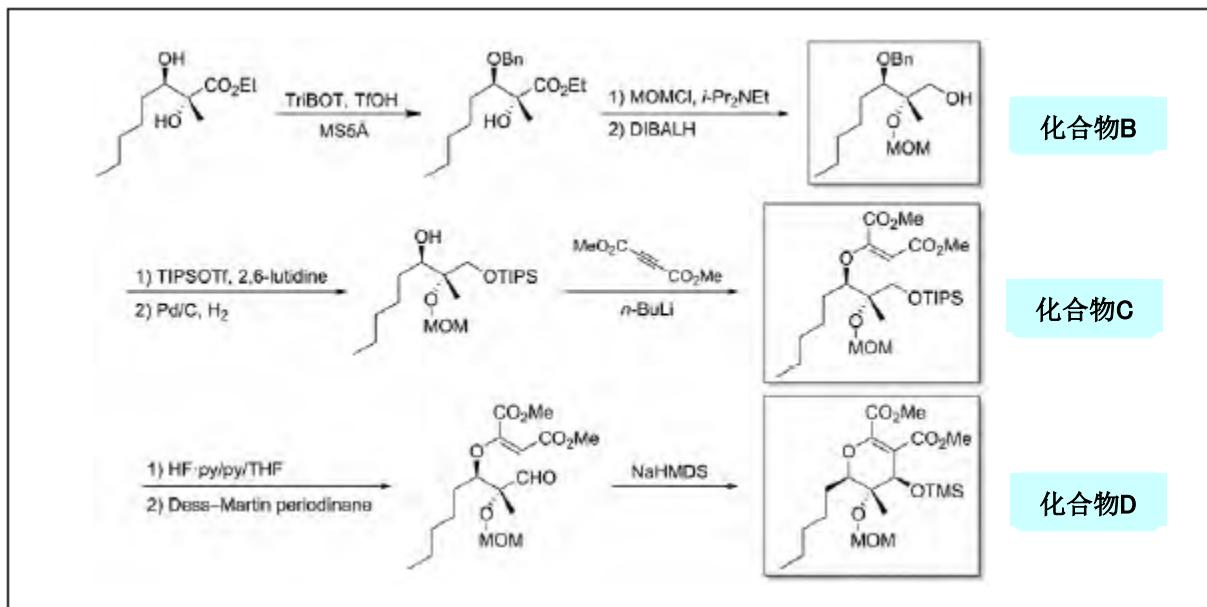
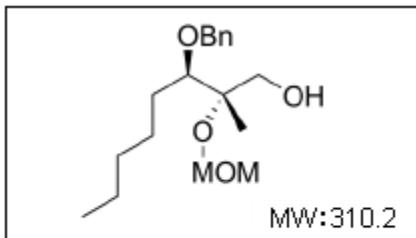


图4 综合合成方案2

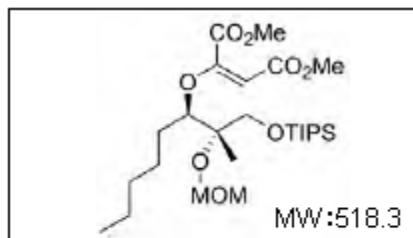
■ 生成物的结构式和质谱谱图

把化合物 B、C、D 用甲醇稀释为 10 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ，直接注入质谱检测器做了检测，观察了钠加合离子。

【化合物B】



【化合物C】



【化合物D】

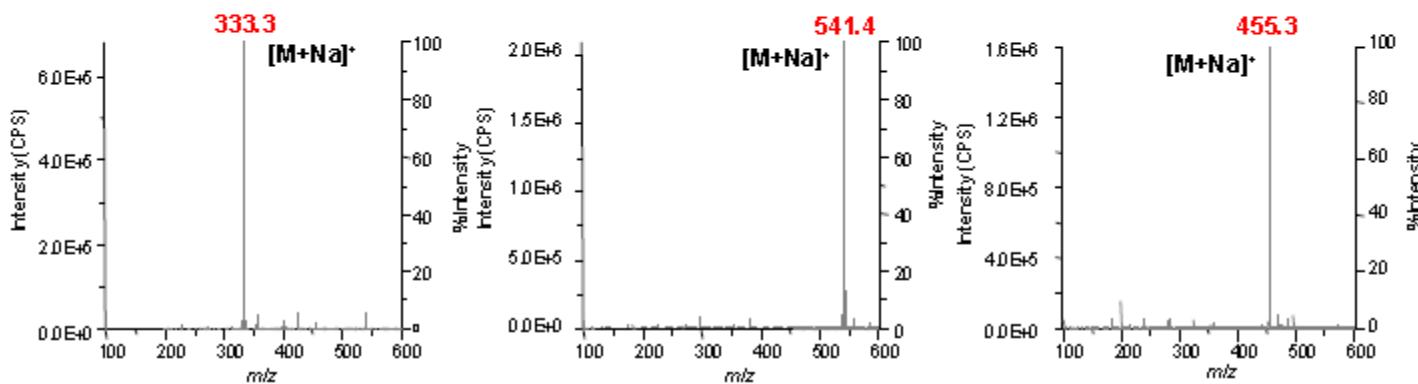
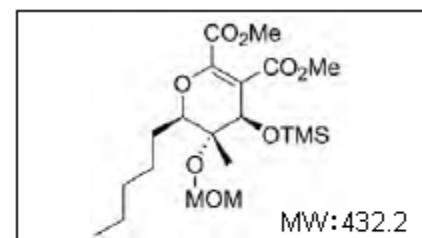


图5 化合物B、C、D的结构式和质谱谱图

* 样品是由 明治药科大学 药学院 生命创新药物研发科学系 药物分子设计研究教研室 所提供的。

<主要模块构成> Chromaster 5610 质谱检测器、注射泵

注意：上述相关数据仅限于检测，不保证个别数据完全符合上述结果。