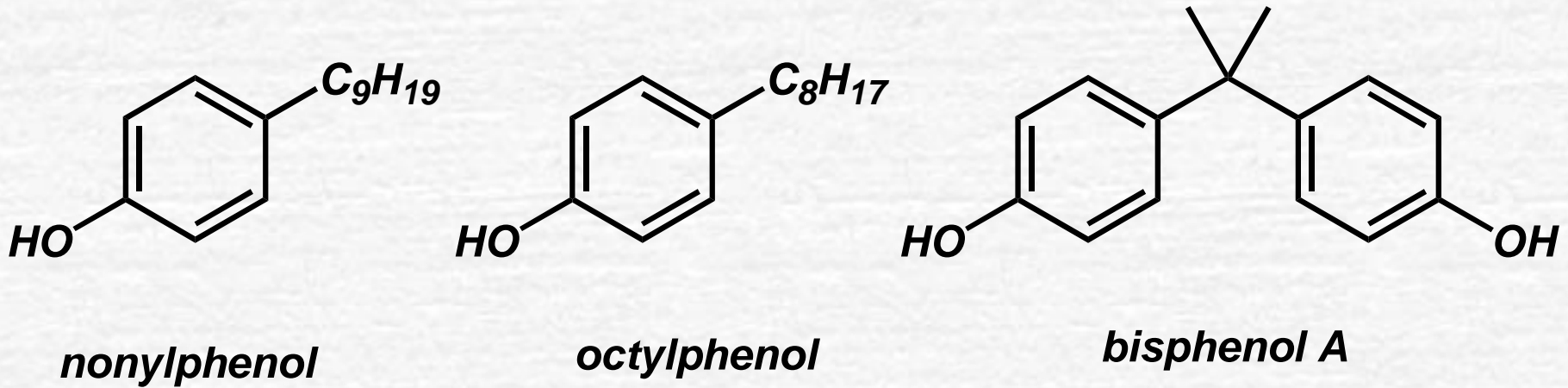


脱プロトン化分子 $[M - H]^-$ の チャージリモートフラグメンテーション

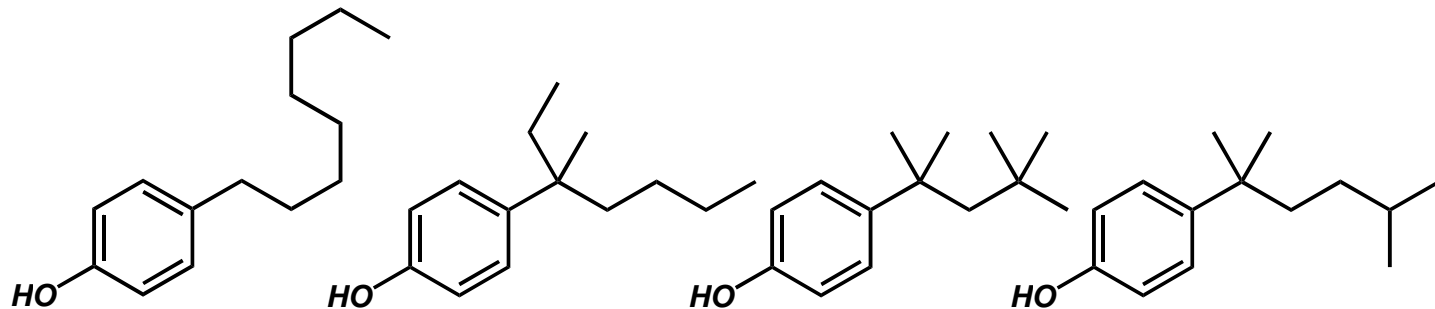
横浜市立大学・高山光男、飯田泰浩

(本内容の無断転載を禁じます)

エストロゲン活性を持ち、生物の成長・分化に影響を与える
環境ホルモン



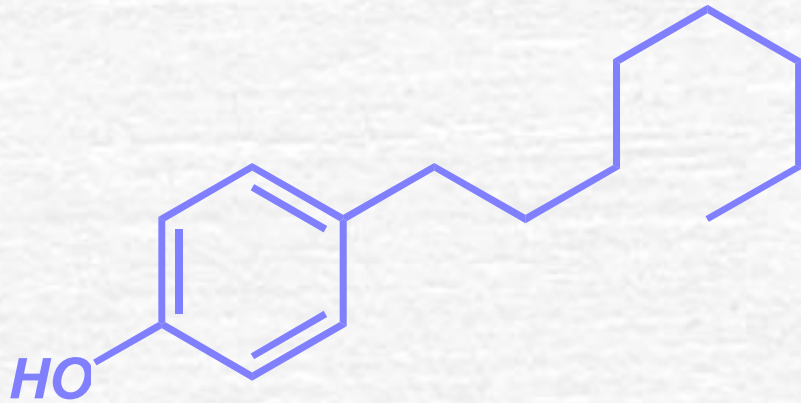
多くの構造異性体が存在



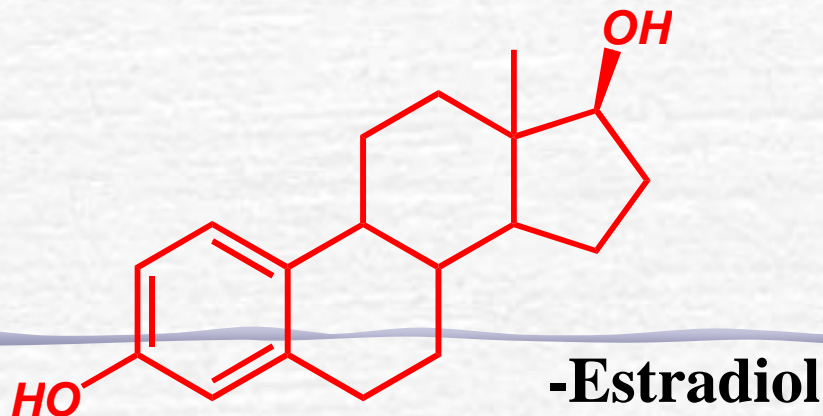
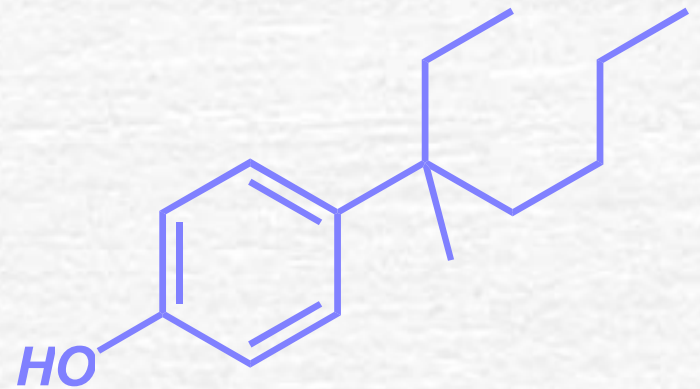
エストロゲン活性の高さ

直鎖型 < 分岐型

(直鎖型)

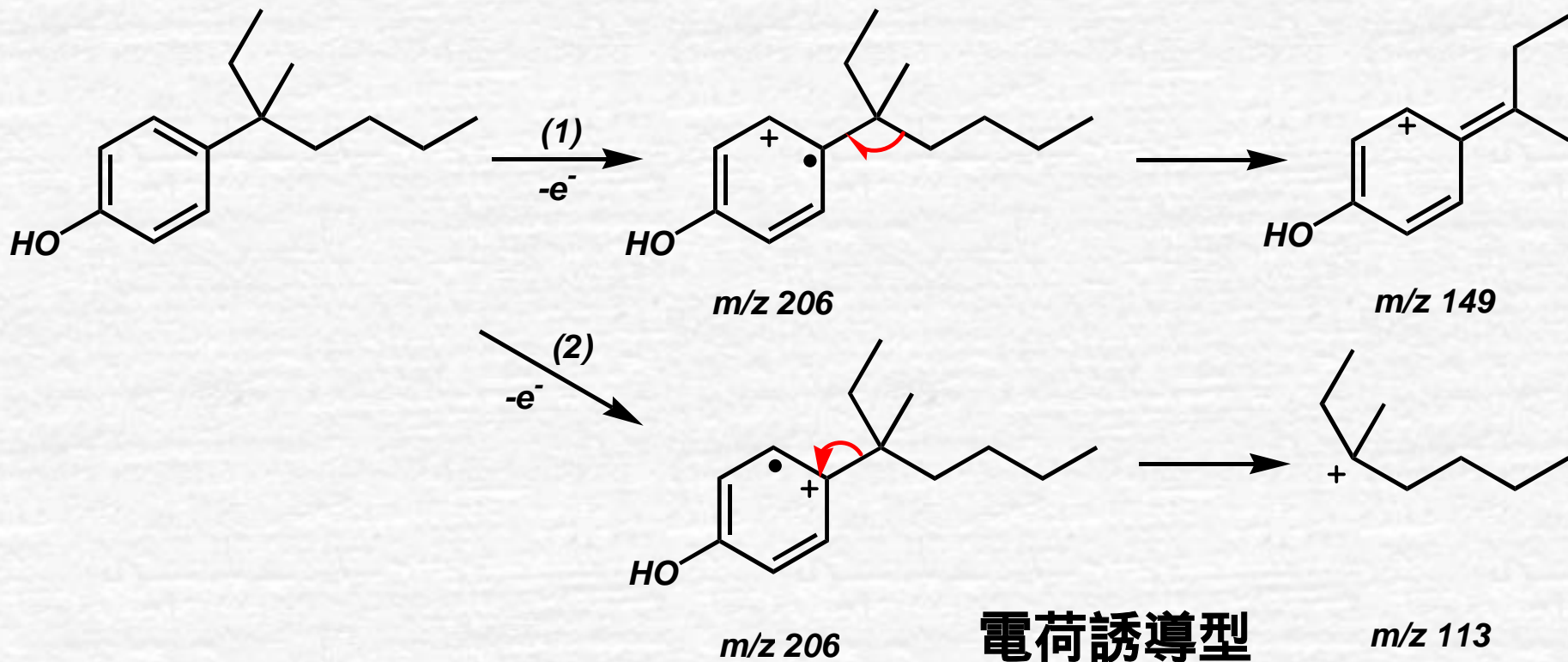


(分岐型)

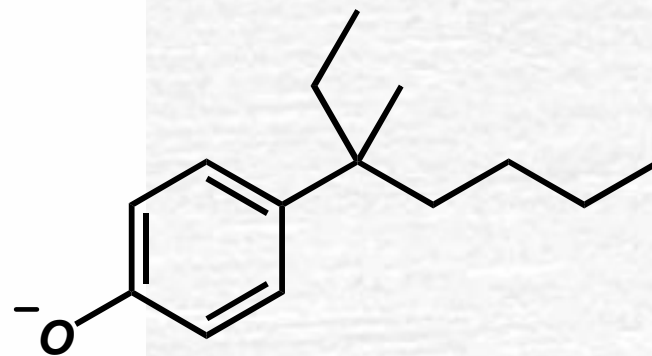
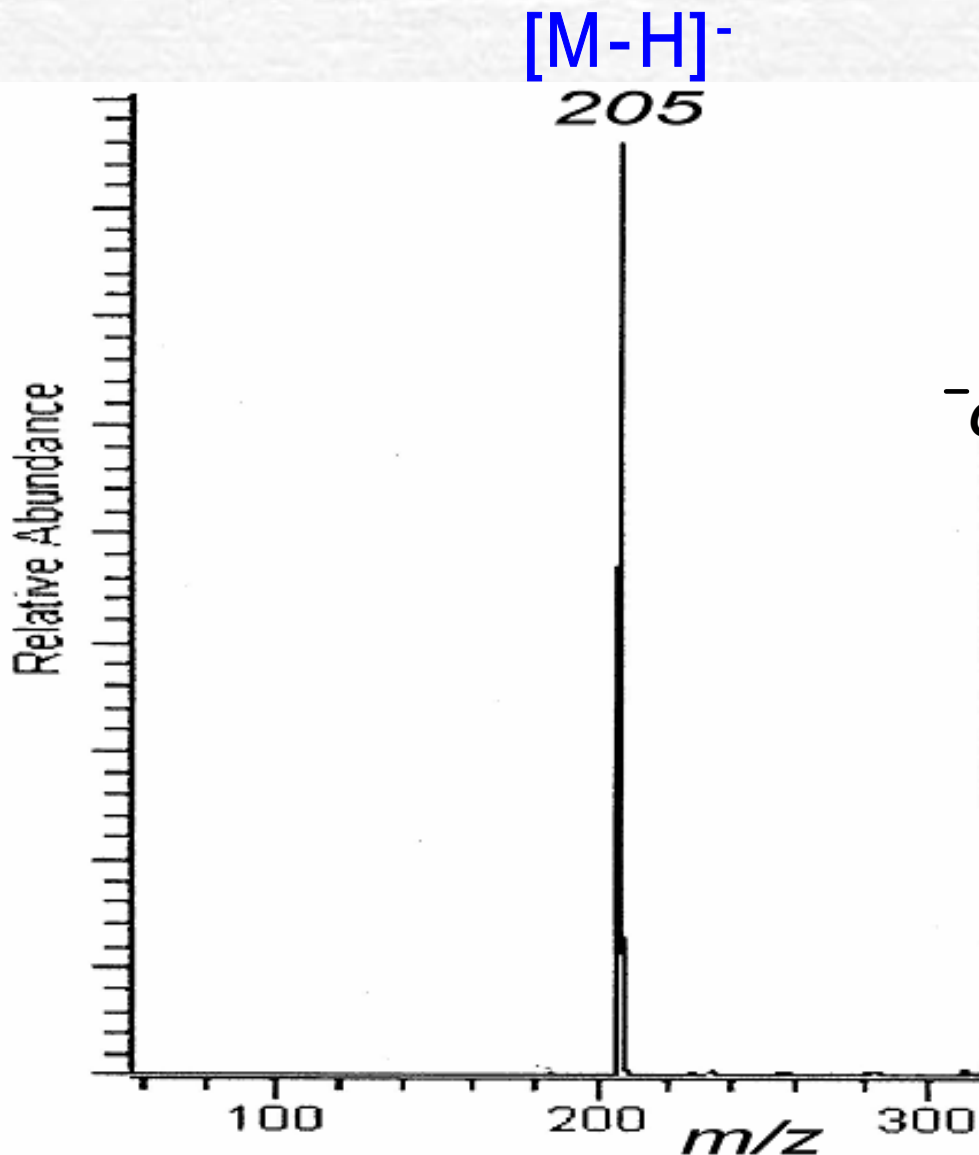


GC/MS を使う正イオンのフラグメンテーション

不對電子誘導型



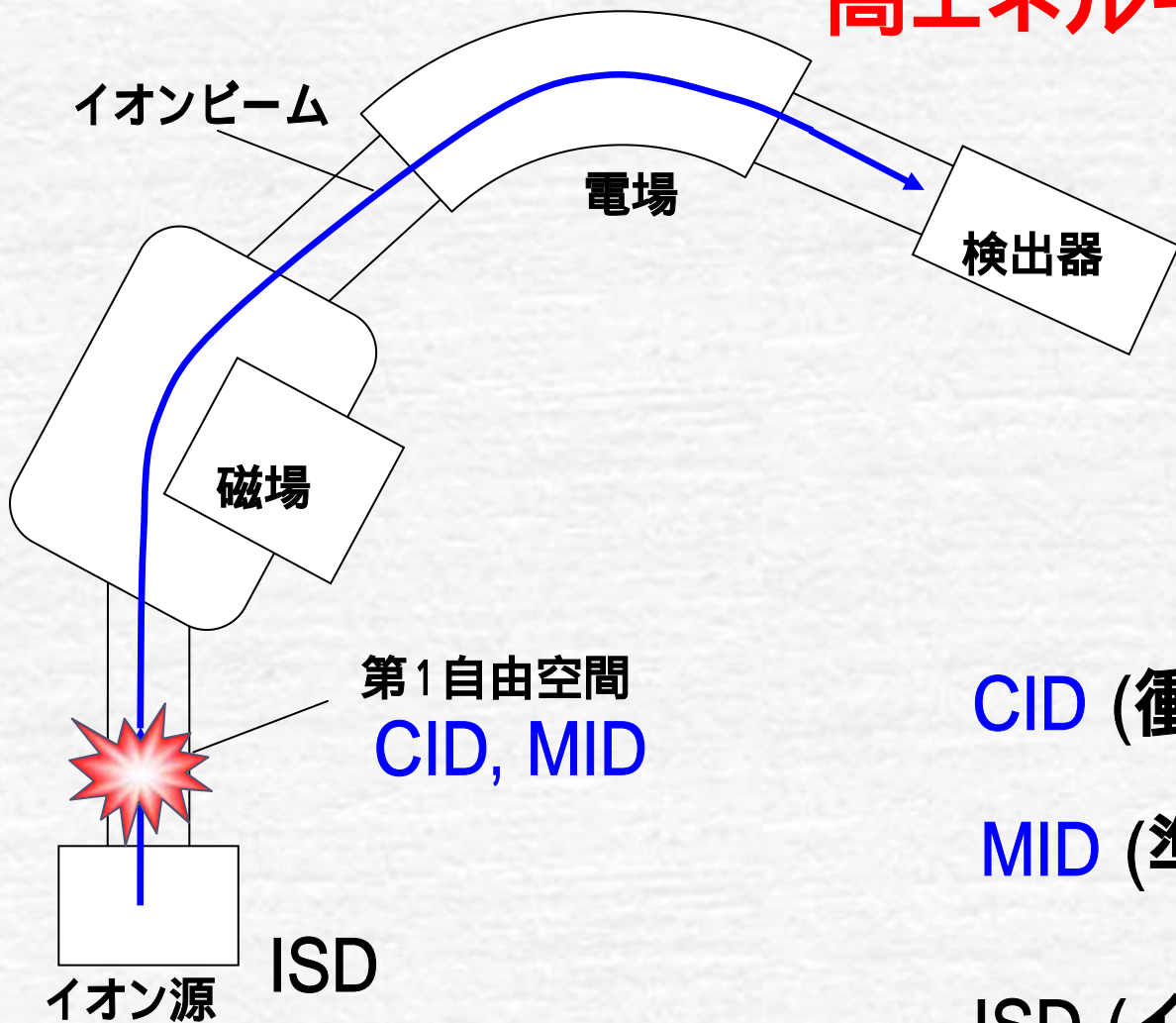
LC/ESIMS を使うとフラグメントが観測されない



$[M-H]^-$ m/z 205

セクター型二重収束質量分析計による

高エネルギー (10keV) CID

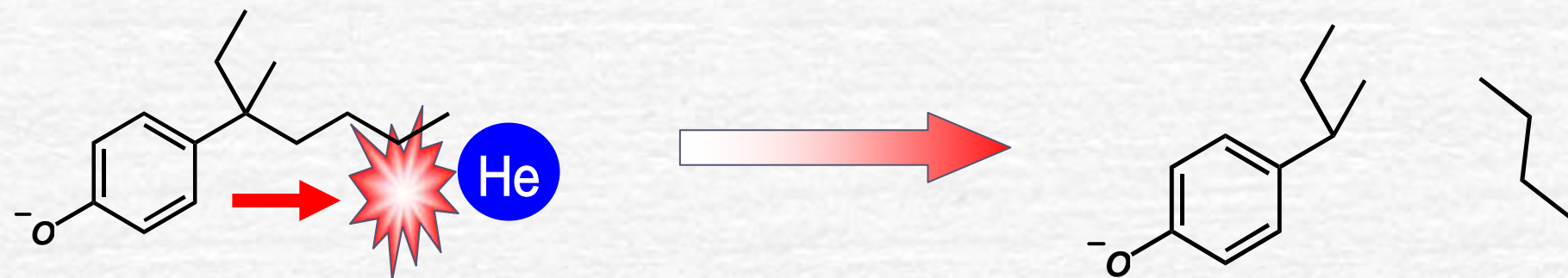


CID (衝突誘起解離)

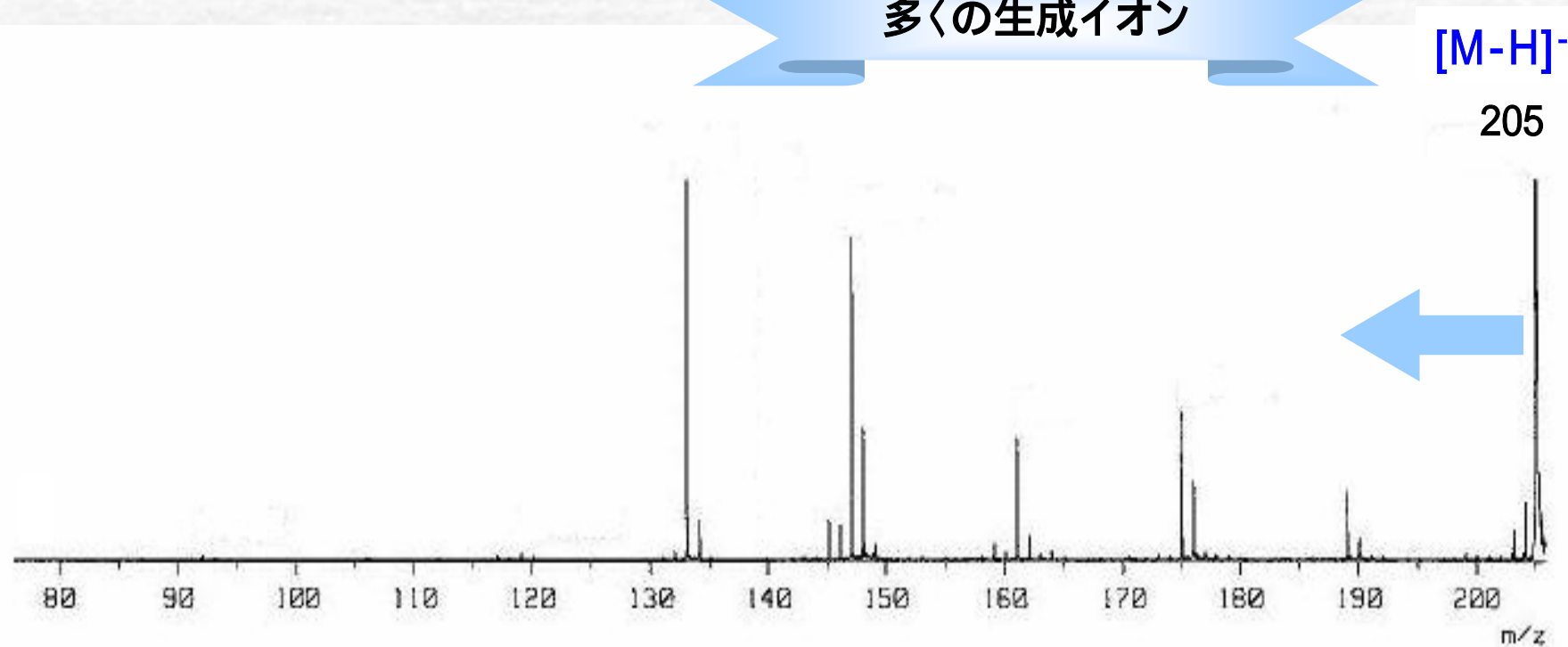
MID (準安定イオン分解)

ISD (インソース分解)

10keV CID によるチャージリモートフラグメンテーション

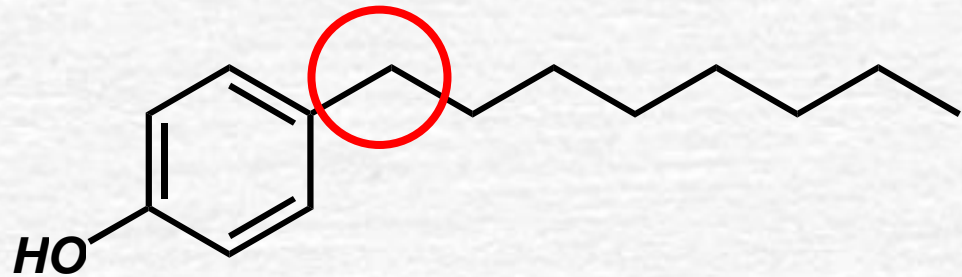


多くの生成イオン

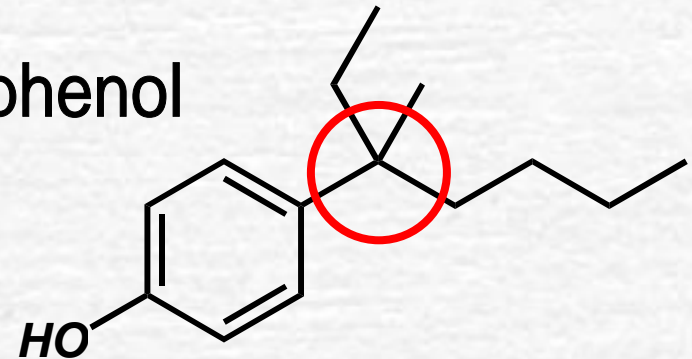


オクチルフェノール異性体の分岐構造を解析

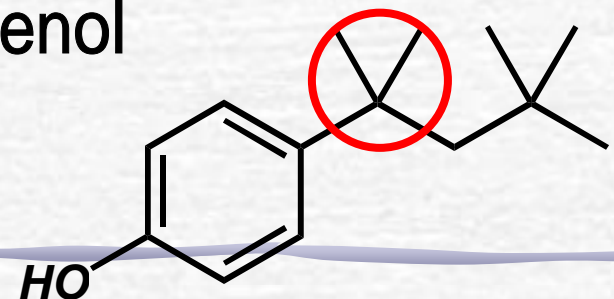
4-n-octylphenol



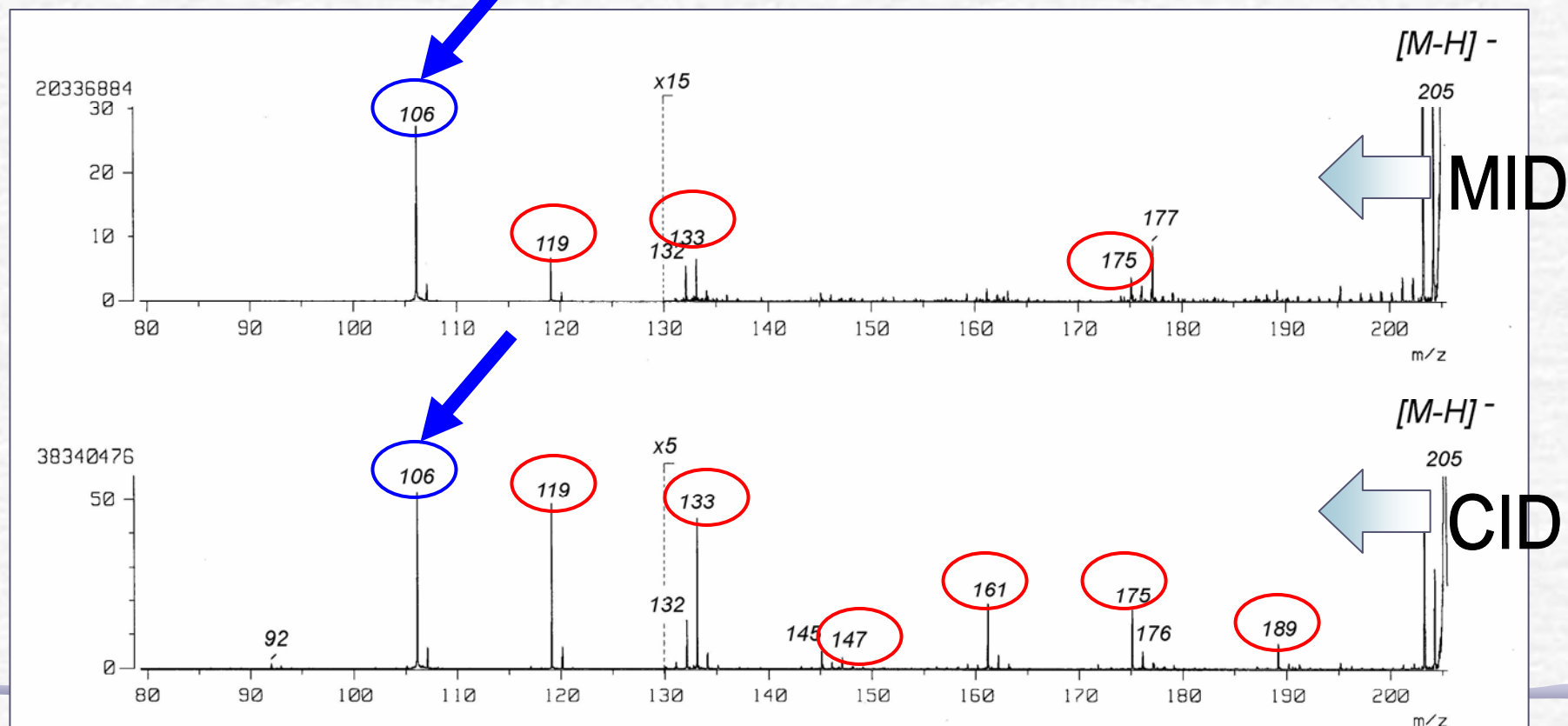
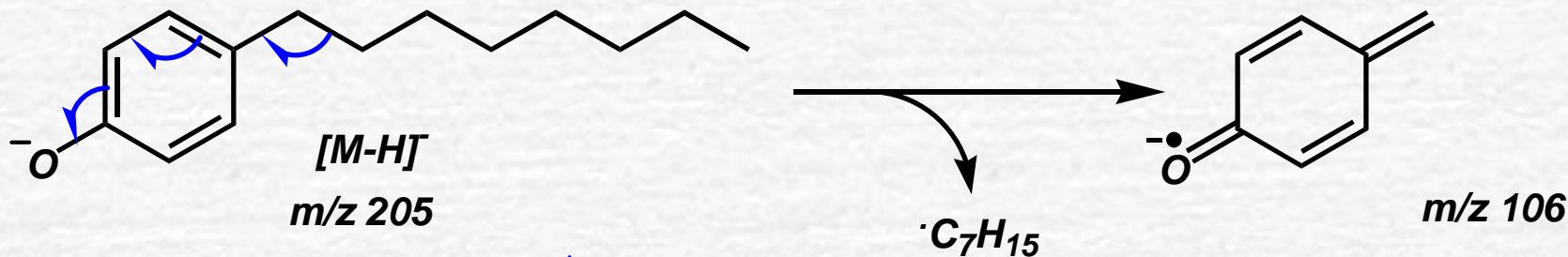
4-(1-ethyl-1-methylpentyl)phenol



4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol

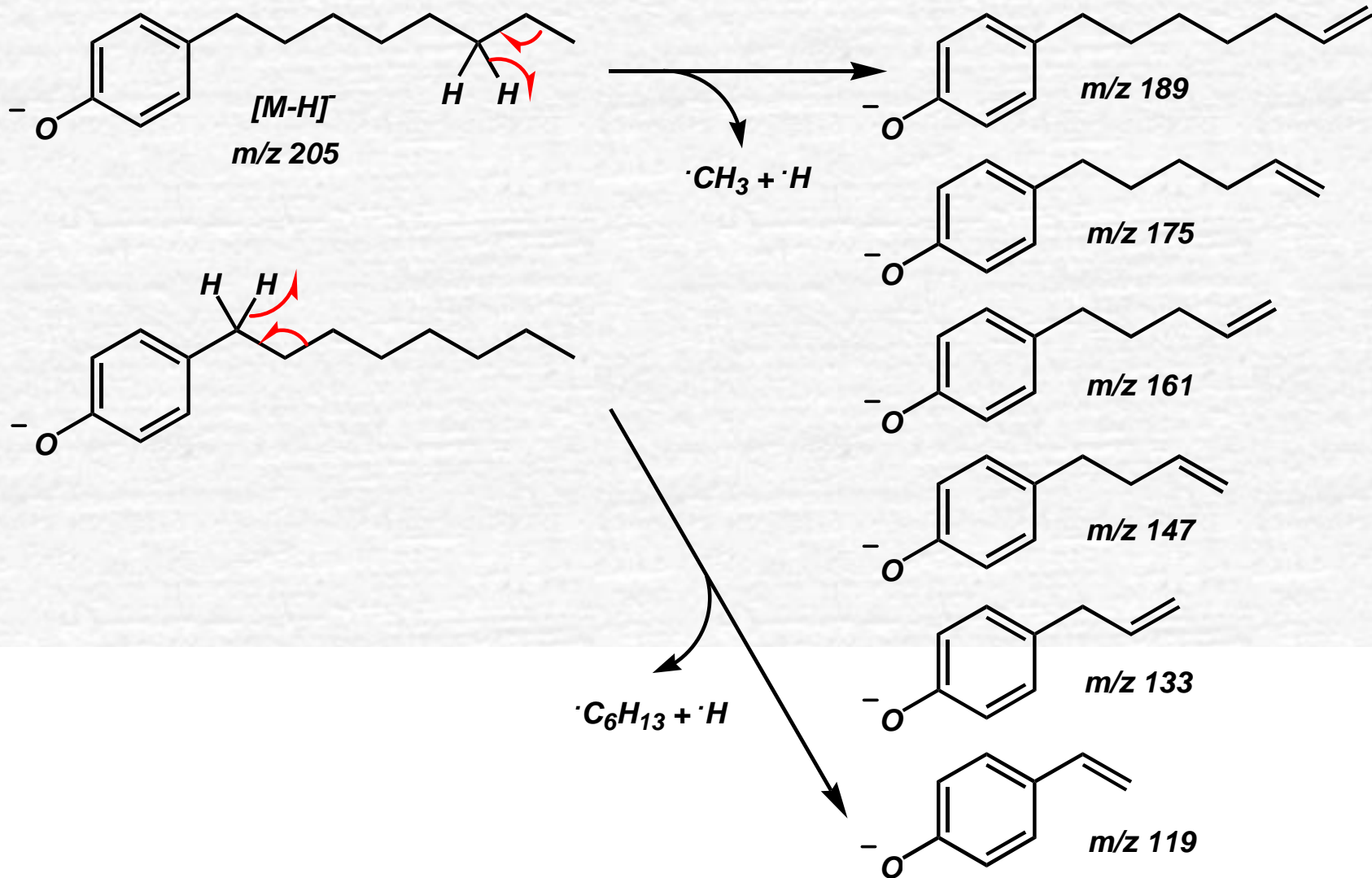


ベンジル位でのアルキル基の脱離 (生成イオンは偶数)

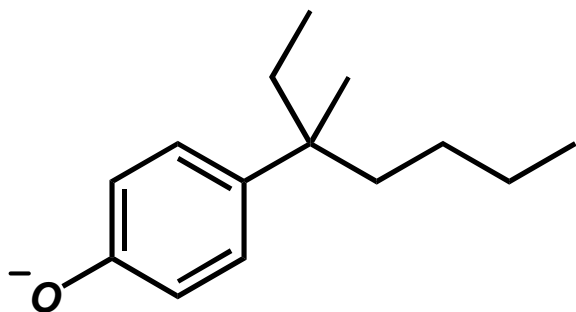


4-n-octylphenol

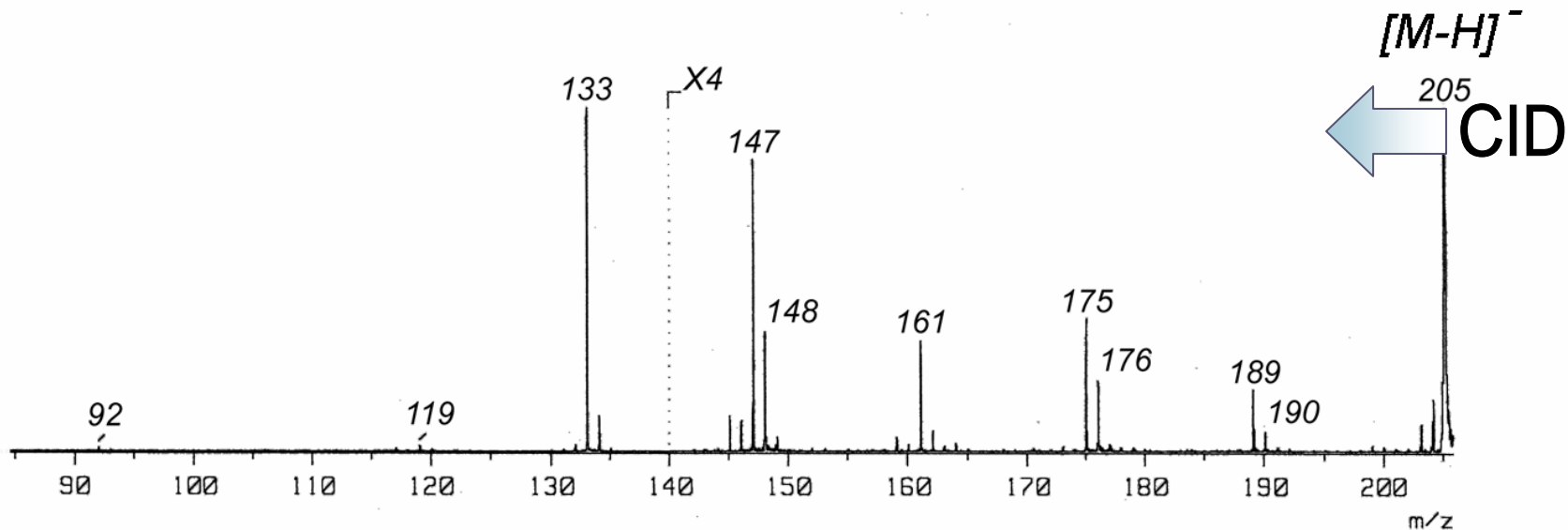
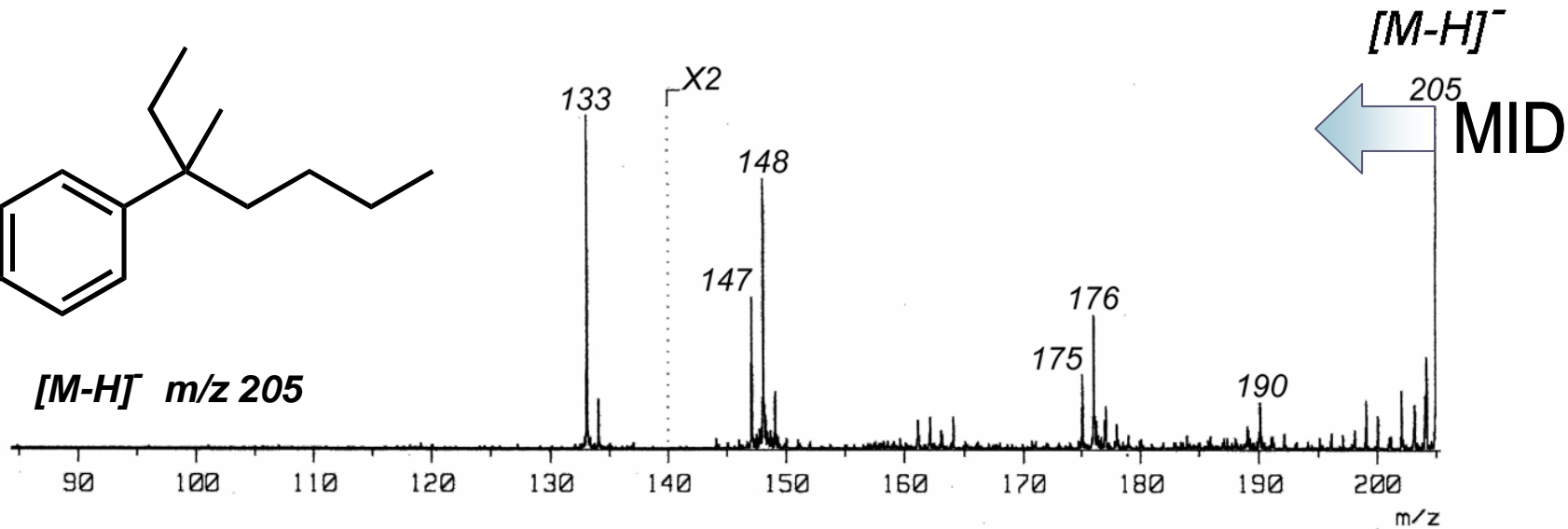
電荷から遠い位置での **位**水素原子の脱離 (生成イオンは奇数)



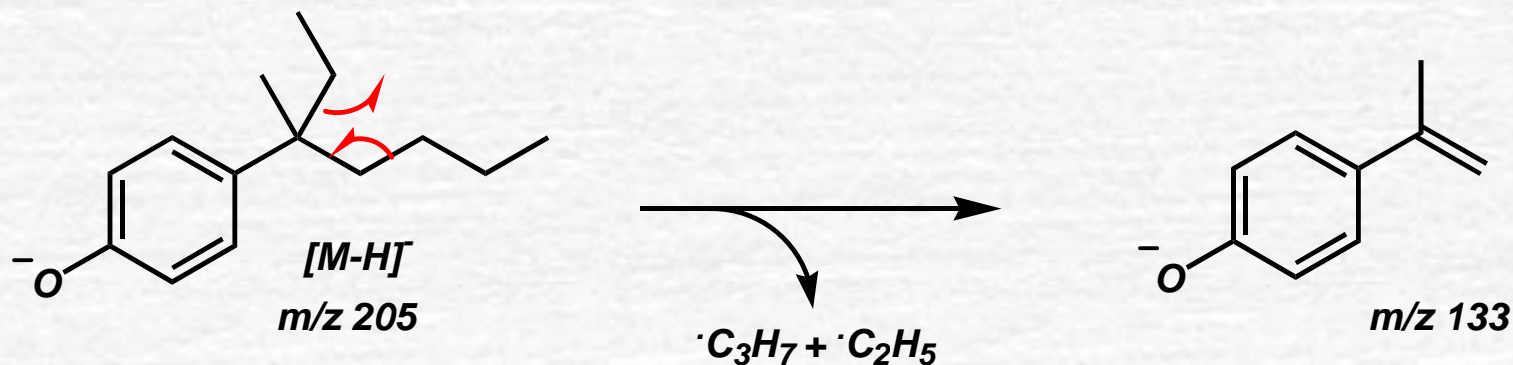
4-(1-ethyl-1-methylpentyl)phenol



$[M-H]^-$ m/z 205



位でのアルキル基/水素原子の脱離 (生成イオンは奇数)



ベンジル位でのアルキル基脱離 (生成イオンは偶数)

