

[Mass Spectrosc., 31, 265 (1983)]

Molecular Orbital Studies on the Relative Sensitivity and the Nature of the Fragmentation from Molecular Ion of some Biologically Important Compounds for Analytical Application of Negative Ion Chemical Ionization Mass Spectrometry

MASAYUKI KUZUYA, TAKACHIYO OKUDA, TOKISHI HAYASHI*
HIROSHI NARUSE*, YOSHIO IIDA**, SHIGEKI DAISHIMA**

負イオンマススペクトルの相対感度といくつかの生物活性物質の
分子イオン開裂特性に関する分子軌道法的研究

葛谷昌之, 奥田高千代, 林 時司*, 成瀬 浩*, 飯田芳男**, 代島茂樹**

負イオンマススペクトル (NICIMS) を利用した生体成分超高感度分析を可能にするには、測定物質を電子親和力の大きい化合物に誘導し感度を高めることおよびその主要フラグメンテーションが測定物質に負電荷が保持されるように起きることが重要である。種々の含フッ素試薬が誘導体化剤として用いられているがその選択基準は確立されていない。本報告において、数種の含フッ素試薬のモデル化合物の MINDO/3 法に MO 計算結果から NICIMS の陽イオンマススペクトルに対する相対感度を高める目的においてとくにトリフルオロ酢酸 (TFA) による誘導化が最も適していること、および置換フェノール類の TFA 化合物の MINDO/3-UHF 法によるアニオンラジカルの計算結果から電子吸引性基の導入は有利なフラグメンテーションを高めることなどを提案した。

* 国立神経センター, ** 成蹊大学工学部

[Mass Spectrosc., 31, 289 (1983)]

Effective Derivatization of Indole Compounds in Negative Ion Chemical Ionization Mass Spectrometry

TOKISHI HAYASHI*, HIROSHI NARUSE*, SATORU KAMADA*,
YOSHIO IIDA**, SHIGEKI DAISHIMA**, MASAYUKI KUZUYA,
TAKACHIYO OKUDA

負イオン化学イオン化質量分析法におけるインドール系化合物の
有効な誘導体化法

林 時司*, 成瀬 浩*, 鎌田 悟*, 飯田芳男**, 代島茂樹**,
葛谷昌之, 奥田高千代

インドール系化合物の代謝研究において、負イオンマススペクトル (NICIMS) を利用する超高感度分析法を確立するために、前報の MO 計算結果の知見をもとに種々のインドール系化合物群のトリフルオロ酢酸 (TFA) およびペンタフルオロプロピオン酸 (PFP) による誘導体化を検討した。その結果、これらの誘導体化は NICIMS の、陽イオンマススペクトル (PICIMS) に対する相対感度を著しく高めるのみならず、その主要フラグメンテーションも合目的様式で起こり、トリプトファンやその代謝産物の検出法として非常に有用な誘導体化法であることを明らかにした。

* 国立神経センター, ** 成蹊大学工学部