

酪胺和多巴胺VUV光电离/解离的实验和理论研究

VUV Photoionization and Dissociation of Tyramine and Dopamine: the Joint Experimental and Theoretical Studies

摘要点击 148 全文点击 65 投稿时间: 2011-11-3 采用时间: 2011-11-22

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/25/01/11-18

中文关键词 [酪胺](#) [多巴胺](#) [VUV光电离](#) [质谱](#) [电离能](#) [解离路径](#)

英文关键词 [Tyramine](#) [Dopamine](#) [VUV photoionization](#) [Mass spectrometry](#) [Ionization energy](#) [Dissociation pathway](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
郭会军	中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥230029	
叶莉莉	中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥230029	
贾良元	中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥230029	
张李东*	中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥230029	zld@ustc.edu.cn
齐飞	中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥230029	

中文摘要

利用同步辐射真空紫外光电质谱和理论计算对中性酪胺和多巴胺分子的光诱导解离过程进行研究。在较低光子能量下, 通过近阈光电离仅得到母体离子信号。当增加光子能量到11.7 eV甚至更高时, 从酪胺和多巴胺分别得到四个清晰可辨的碎片离子信号。另外通过测量母体离子的光电离效率曲线, 酪胺和多巴胺分子的电离能分别为7.98和7.67 eV(实验误差为 ± 0.05 eV)。结合理论计算建立这两个分子的详细碎裂路径, 包括相似的胺乙基消除路径。其中碎片 $C_7H_8O_2^+$ ($m/z=124$)和 $C_7H_8O^+$ ($m/z=108$)的生成认为来自McLafferty重排, 该过程经历分子内的 γ 氢迁移诱导的 β 开裂反应。另外, C7-C8键直接开裂可以生成 $CH_2NH_2^+$ ($m/z=30$)碎片离子, 并且该过程和McLafferty重排为主要的裂解路径。

英文摘要

Photon induced dissociation investigations of neutral tyramine and dopamine are carried out with synchrotron vacuum ultraviolet photoionization mass spectrometry and theoretical calculations. At low photon energy, only molecular ions are measured by virtue of near-threshold photoionization. While increasing photon energy to 11.7 eV or more, four distinct fragment ions are obtained for tyramine and dopamine, respectively. Besides, the ionization energies of tyramine and dopamine are determined to be 7.98 ± 0.05 and 7.67 ± 0.05 eV by measuring the photoionization efficiency curves of corresponding molecular ions. With help of density function theory calculations, the detailed fragmentation pathways are established as well. These two molecular cations have similar aminoethyl group elimination pathways, $C_7H_8O_2^+$ ($m/z=124$) and $C_7H_8O^+$ ($m/z=108$) are supposed to be generated by the McLafferty rearrangement via γ -hydrogen (γ -H) shift inducing β -fission. And $CH_2NH_2^+$ is proposed to derive from the direct fission of C7-C8 bond. Besides, the McLafferty rearrangement and the C7-C8 bond fission are validated to be dominant dissociation pathways for tyramine and dopamine cations.

Copyright@2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn