

令和 6 年 6 月 18 日現在

機関番号：22701

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21K12223

研究課題名(和文) 精密コロナ放電と衝突誘起解離質量分析法を用いたテルペン酸化体の官能基同定法の開発

研究課題名(英文) Development of an identification method of functionality from alpha-pinene oxidation using an accurate corona discharge ionization collision-induced dissociation mass spectrometry

研究代表者

関本 奏子 (Sekimoto, Kanako)

横浜市立大学・生命ナノシステム科学研究科(八景キャンパス)・准教授

研究者番号：40583399

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、(1) 精密コロナ放電イオン化法と高分解能衝突誘起解離質量分析法、あるいは、(2) 誘導体化反応、スプレーイオン化法、および高分解能衝突誘起解離質量分析法を組み合わせ、種々のモノテルペン酸化体に含まれる官能基を正確に同定するための手法2種を開発した。本手法を用い、過去に報告の無い、alpha-pineneのオゾン酸化物の官能基を同定することに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

気候や環境、人体の健康に多大な影響を及ぼす二次有機エアロゾル(SOA)の生成過程の解明は、近年の大気化学において重要な課題となっている。SOAの主な生成源としてモノテルペンの酸化体が注目されているが、それら化合物の大部分において、官能基や構造は同定されておらず、SOA生成過程の理解に至らない原因となっている。このような状況を打開するため、本研究では、種々のモノテルペン酸化体に含まれる官能基を正確に同定するための手法を開発した。

研究成果の概要(英文)：In this study, we developed two techniques to accurately identify functional groups included in various monoterpene oxidation products, using (1) accurate corona discharge ionization method and high-resolution collision-induced dissociation mass spectrometry (HR-CID-MS), and (2) derivatization reactions, electrospray ionization method, and HR-CID-MS. As a result, we successfully identified functional groups in ozonolysis products of alpha-pinene that have not been reported so far.

研究分野：質量分析学、大気化学

キーワード：精密コロナ放電イオン化法 エレクトロスプレーイオン化法 高分解能質量分析 衝突誘起解離法 誘導体化 モノテルペン 酸化

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

二次有機エアロゾル (Secondary Organic Aerosol; SOA) は、自然排出源または人為排出源から大気中に発生する揮発性有機化合物 (Volatile Organic Compound; VOC) が光化学酸化することで生成する粒子状物質である。それらは、気候変動や大気質、雲形成、人体の健康などに多大な影響を与えることが知られているが、生成過程については不明瞭な点が多い。そのため、SOA の生成過程の解明は、大気化学分野において喫緊の課題となっている。

2014年に、植物から放出されたモノテルペン (C₁₀H₁₆) に6個以上の多数の酸素原子が結合した様々な揮発性有機化合物 (Highly Oxygenated Organic Molecule; HOM) が実際の森林で観測された (M. Ehn et al., *Nature*, 2014)。このような酸素を多く含む化合物は極めて揮発性が低く、SOA 生成に深く関わっている可能性がある。そのため近年では、HOM と SOA の関係に焦点を当てた研究が盛んに行われている。モノテルペンの酸化体は、様々な官能基 (例えば、カルボキシ基やカルボニル基、アルデヒド基、ヒドロキシ基、エポキシ基、ペルオキシド基など) を有することが知られている。SOA 生成能に関連するヒドロキシラジカルやオゾンとの反応性は官能基によって異なるため、HOM を介した SOA 生成を議論するためには、HOM が有する官能基を正確に把握することが必須である。HOM の検出にはこれまで、微量成分のリアルタイム計測が可能な化学イオン化法が使われてきたが、既存手法の限界から、正確に同定されるのは元素組成のみであった。すなわち、官能基や構造に関しては推定するにとどまり、それらを同定するための手法開発はほとんど為されてこなかった。

2. 研究の目的

1に記載した背景を基に、本研究では、「(1) 精密コロナ放電イオン化法 + 高分解能質量分析計 + 衝突誘起解離 (Collision-Induced Dissociation; CID) 法^{注1)}」、または「(2) 誘導体化反応 + エレクトロスプレーイオン化 (Electrospray ionization; ESI) 法 + 高分解能質量分析計 + CID 法」の組み合わせにより、クロマトグラフィーを使わず、種々のモノテルペン酸化体に含まれる官能基を正確に同定するための手法2種の開発を目的とした。

手法(1)の独自性は、精密コロナ放電イオン化法を用いることにある。本イオン化法は、研究代表者の関本が開発してきた大気圧化学イオン化法の一つであり、様々な大気中 VOC をリアルタイムに、効率良くプロトン化/脱プロトン化させる (K. Sekimoto and M. Takayama, *Eur. Phys. J. D*, 2010 など)。本イオン化法によって、既存手法では不可能であったテルペン酸化体 HOM の脱プロトン化が可能となり、酸化体の本来持つ中性状態の構造を反映した CID パターンを観測することができる。HOM の測定手法として、これまで、NH₄⁺や NO₃⁻を試薬イオンとした化学イオン化法が使われてきた (T. Berndt et al., *Environ. Sci. Technol.*, 2018 など)。ここでは、酸化体 (M) は試薬イオンの付加体 ([M+NH₄]⁺や[M+NO₃]⁻) としてイオン化される。しかし、それらを CID しても、NH₄⁺から酸化体へプロトンが移動することにより酸化体の構造が変化してしまう、あるいは、NO₃⁻の高い気相酸性度により酸化体がイオンになりにくく、酸化体の CID パターンを観測し難い。一方、精密コロナ放電イオン化法では、気相酸性度が低く、有機化合物からプロトンを引き抜きやすい O₂を試薬イオンとした化学イオン化が可能であり、酸化体の中性状態の構造を反映した解離パターンを取得できる。

手法(2)では、複数の誘導体化試薬を用い、テルペン酸化体の多くが有する官能基、すなわちケト基、ヒドロキシ基、またはカルボキシ基を、オキシム化、アシル化、またはメチルエステル化する。それらを ESI 法によってプロトン化した後に CID を行い、各誘導体からの特異的な中性種脱離を観測することで、各酸化体に含まれる官能基の同定が可能となる。

計測目的のテルペン酸化体は、手法(1)では気体として、手法(2)では液体として供される。このようなアプローチの異なる2種の手法を併用することで、より精度の高い同定が可能になると期待される。また、手法(1)と(2)はクロマトグラフィーを用いることなく構造解析が可能であるため、カラム吸着によるサンプルの損失等避け得る。

注1) CID 法とは、質量分析計に導入された或るイオンを選択し、不活性ガスと衝突させ、分解させる手法。

3. 研究の方法

試料

本研究では、 α -pinene、 α -pinene 酸化体に関連する標準品、および誘導体化試薬を用いた。各試薬は東京化成工業株式会社、シグマアルドリッチ、または富士フィルム純薬株式会社から購入

し、いずれも追加の精製は行わずに使用した。各種試薬の重水素ラベル化は分担者の入江が実施した。

α -pinene 酸化体を誘導体化する際には、 α -pinene 酸化体標準品または α -pinene のオゾン酸化物と誘導体化試薬を等 mol 混合し、アセトニトリルおよび水を溶媒として 10 mM に調製した後、0~3 時間常温で保存した。

質量分析

精密コロナ放電の電極には、ステンレス製の針（志賀昆蟲普及社；針の先端曲率半径は 1 μm 、先端表面形状は放物線の回転体として近似可能）と質量分析計のオリフィス板を用いた。針に印加した電圧は-2.0~3.5kV、オリフィスの温度は 80°C であった。試料をイオン化するには、マイクロセラミックヒーターを用いて試料そのものを加熱気化させ供給した。

ESI の流速は 20 $\mu\text{L}/\text{min}$ とし、オリフィスの温度は 320°C であった。試料には、上記の誘導体化試薬を 10 倍希釈した 1 mM の溶液を用いた。

高分解能質量分析計には、Q Exactive Focus 四重極-オービトラップ型（サーモフィッシャーサイエンティフィック社製）を用いた。質量分解能は 70,000 (FWHM @ m/z 200) であった。CID 法におけるプリカーサーイオンの選択幅は ± 0.4 Da、衝突ガスは N_2 、衝突エネルギーは 10 eV (lab) であった。

α -pinene のオゾン酸化

手法(1)では、約 4.0×10^{-2} μmol の α -pinene と約 10×10^{-2} μmol のオゾンとを 10L テフロンバッグ内で 1 時間反応させたものを使用した。手法(2)では、約 5 ppmv のオゾンとを 0.2 L/min の流速にて 200 μL の α -pinene 溶液中に流し、1 時間バブリングさせたものを使用した。オゾンは、160-400 nm の波長を有する UV ランプ（Excelitas Noblelight 社製）を用いて生成させた。

4. 研究成果

手法 (1)：精密コロナ放電イオン化法と高分解能衝突誘起解離質量分析法を用いたテルペン酸化体の官能基同定法の開発

本項目では、 α -pinene の酸化体に関連する標準品を用い、脱プロトン分子の CID スペクトルを取得したところ、酸化体の有する官能基と CID パターンには規則性があることを見出した。例として、pinonic acid, pinic acid, および pinolic acid の脱プロトン分子の CID スペクトルを Figure 1 に示す。カルボキシ基とカルボニル基を有する pinonic acid では、 H_2O , CO_2 , および $\text{C}_2\text{H}_2\text{O}$ (ケテン) の脱離が (図 1a), ジカルボン酸である pinic acid では、 H_2O , CO_2 , および H_2CO_3 の脱離が (図 1b), カルボキシ基とヒドロキシ基を有する pinolic acid では CH_2O_2 の脱離が観測された (図 1c)。これらの CID パターンを同位体ラベル試薬 (例えば、図 2c に示した重水素化 pinolic acid $\text{C}_{10}\text{H}_{17}\text{DO}_3$) を用いて精査した結果、 H_2O と CO_2 の脱離は、水素転移を伴わないカルボキシ基の存在を、 CH_2O_2 (= $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$) の脱離は水素転移を伴うカルボキシ基の存在を、 $\text{C}_2\text{H}_2\text{O}$ の脱離はカルボニルの存在を、 H_2CO_3 の脱離からは 2 つのカルボキシ基の存在を反映していることが分かった。

他の標準品の結果をも考慮すると、酸化体の有する官能基と CID における中性種脱離の関係は Table 1 のようにまとめられる。官能基の種類、および官能基が脱プロトン化しているか、または中性を保っているかによって、脱離パターンが変わることが明らかとなった。

手法 (2)：誘導体化法、エレクトロスプレーイオン化法、および高分解能衝突誘起解離質量

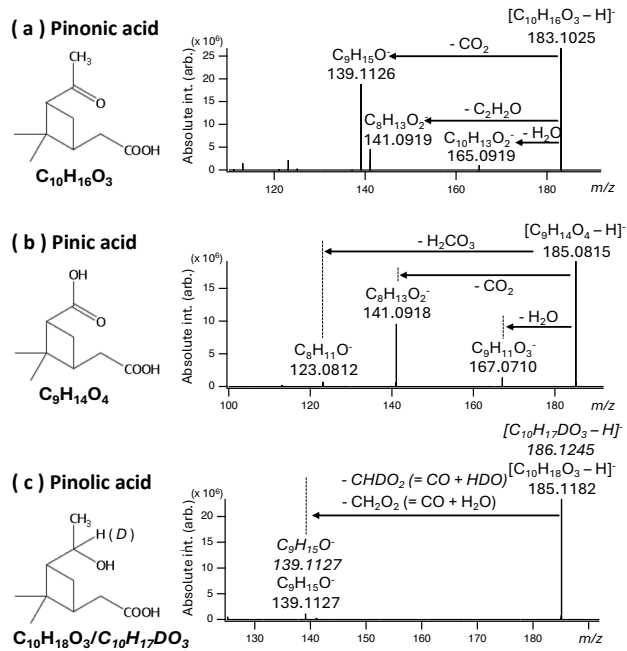


Figure 1. CID spectra of deprotonated molecules of (a) pinonic acid ($\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}_3$), (b) pinic acid ($\text{C}_9\text{H}_{14}\text{O}_4$), and (c) pinolic acid ($\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{O}_3/\text{C}_{10}\text{H}_{17}\text{DO}_3$).

Table 1. Relationship between functional group of α -pinene oxidation products and neutral loss in CID.

Functional group	Neutral loss in CID	
	Neutral	Deprotonated
R-COOH (Carboxyl)	HCOOH	CO_2
R-OH (Hydroxyl)	H_2O	-
R-OOH (Peroxy)	H_2O_2	-
R-CHO (Aldehyde)	CO, CH_3CHO	-
R-COCH ₃ (Acetyl)	$\text{C}_2\text{H}_2\text{O}$	-
R-CO-R' (Carbonyl)	CO	-

分析法を用いたテルペン酸化体の官能基同定法の開発

本項目では、種々の α -pinene 酸化体の標準品に対して、Figure 2 に示す 3 種類の誘導体化を行った。すなわち、O-(2,3,4,5,6-pentafluorobenzyl) hydroxylamine (PFBHA) によってケト基（カルボニル基またはアルデヒド基）をオキシム化，trimethylsilyl diazomethane (TMSDM) によってカルボキシ基をメチルエステル化，または無水酢酸 (AA) によってヒドロキシ基をアシル化した。生成した誘導体（オキシム，メチルエステル，またはアセテート）は ESI 法によって効率良くプロトン化され，それらを CID すると，オキシムからは $C_xH_yONF_5$ (x と y はケト基の構造に依る)，メチルエステルからはメタノール，アセテートからは酢酸が特異的に脱離することが明らかとなった (Figure 3)。

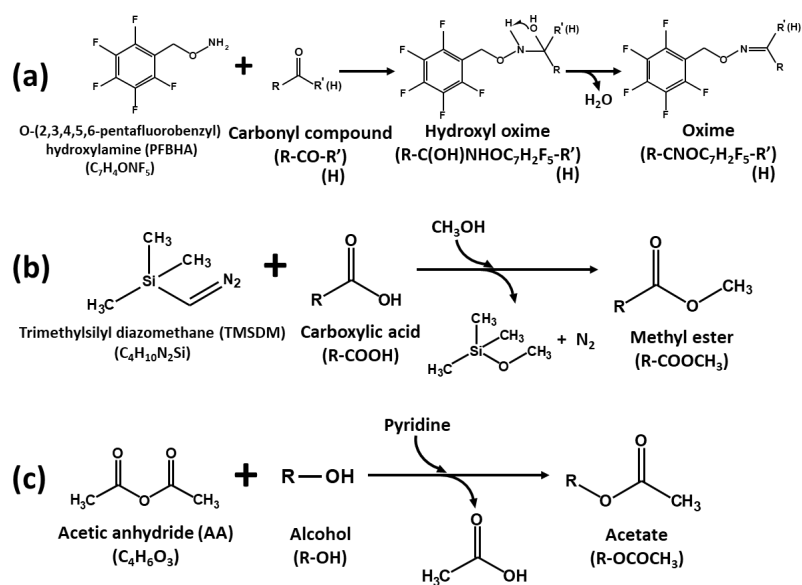


Figure 2. Derivatization reactions used in this study. (a) Oximation of carbonyl compounds by PFBHA, (b) methyl esterification of carboxylic acids by TMSDM, and (c) acylation of alcohols by AA.

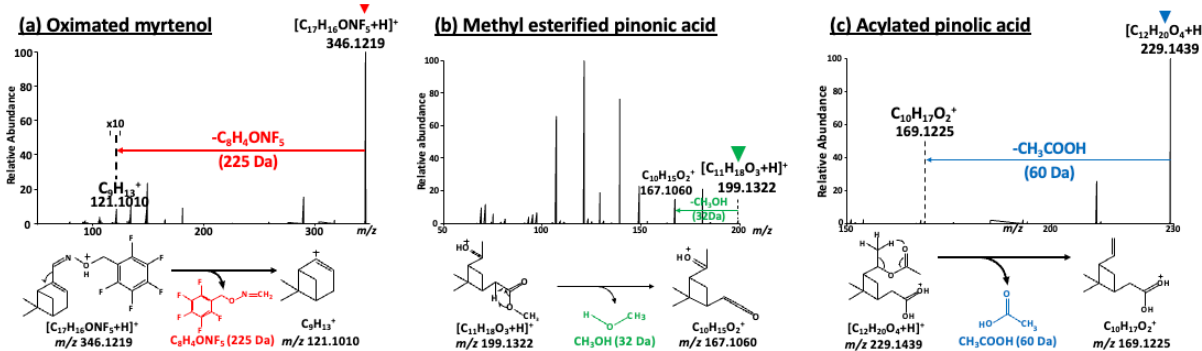


Figure 3. CID spectra and corresponding fragmentation pathways for (a) oximated myrtenol, (b) methyl-esterified pinonic acid, and (c) acylated pinonic acid.

α -pinene のオゾン酸化体の官能基解析

手法 (1) と (2) を用い，オゾンによって α -pinene を酸化させた際の生成物の官能基解析を行った。結果の一部として， $C_9H_{14}O_3$ (M_r 170)， $C_{10}H_{16}O_3$ (M_r 184)，および $C_9H_{14}O_4$ (M_r 186) の同定結果を Table 2 に示す。同定された官能基の多くは，過去の文献内で推定されているものと同等であった。一方，過去には報告されていない新規の官能

Table 2. Candidates of functional groups in several ozonolysis products of α -pinene estimated in this study and previous studies.

M_r	Elemental composition	Functional group	Positive-ion ESI-CID-MS and derivatization reactions ^a	Negative-ion APCID-CID-MS ^a	Compounds reported in literature
170	$C_9H_{14}O_3$	Aldehyde group (R-CHO)	○	○	pinic acid pinic-4-acid compound A - - norpinonic acid pinic acid pinic-4-acid - compound A
		Keto group+Aldehyde group (R-COCHO) ^c	○	○	
		Keto group+Hydroxyl group (R-COCH ₂ OH) ^c	○	○	
		Carboxyl group (R-COOH)	○	○	
		Hydroxyl group (R-OH)	○	○	
		Peroxy group (R-OOH)	-	N.D.	
184	$C_{10}H_{16}O_3$	Aldehyde group (R-CHO)	○	○	8-hydroxy pinonaldehyde 10-hydroxy pinonaldehyde compound B pinonic acid 8-hydroxy pinonaldehyde compound B - 10-hydroxy pinonaldehyde pinonic acid 8-hydroxy pinonaldehyde 10-hydroxy pinonaldehyde
		Acetyl group (R-COCH ₃)	○	○	
		Keto group+Aldehyde group (R-COCHO) ^c	○	○	
		Keto group+Hydroxyl group (R-COCH ₂ OH) ^c	○	○	
		Carboxyl group (R-COOH)	○	○	
		Hydroxyl group (R-OH)	○	○	
186	$C_9H_{14}O_4$	Aldehyde group (R-CHO)	N.D.	○	compound C pinic acid 9-hydroxy norpinonic acid pinic acid 9-hydroxy norpinonic acid 9-hydroxy norpinonic acid compound C
		Acetyl group (R-COCH ₃)	N.D.	○	
		Carboxyl group (R-COOH)	○	○	
		Hydroxyl group (R-OH)	○	○	
		Peroxy group (R-OOH)	-	○	

a: "○" indicates that a functional group is possible to identified.

"N.D." indicates that a functional group is not observed.

"-" indicates that a functional group cannot be derivatized.

b: The compounds with its functional group have been reported in previous studies. The structure of these compounds show in Figure S5.

"-" indicates that no compounds with its functional group has been reported in previous studies.

c: The combinations of these functional groups are shown in above. When $CHNO_2$, H_2F_5 -CHO loss occurs, the keto group + aldehyde group is estimated, in the case of $CHNO_2$, H_2F_5 - CH_2OH loss, the keto group + hydroxyl group is estimated.

基の存在を示唆する結果も得られた。例えば、 $C_9H_{14}O_3$ において、手法(1)と(2)では「ケト+アルデヒド基 (R-COCHO)」と「ケト+ヒドロキシ基 (R-COCH₂OH)」が同定されたが、過去にはそのような構造は報告されていない。

以上の結果より、手法(1)と(2)はテルペン酸化体の官能基同定に利用し得ることが示された。今後は、当該手法を、森林等の実大気に含まれるテルペン酸化体の計測に応用していく予定である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 10件 / うちオープンアクセス 9件）

1. 著者名 Hongo Yayoi, Sekimoto Kanako	4. 巻 71
2. 論文標題 Interpretation of MS/MS Spectra	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Mass Spectrometry Society of Japan	6. 最初と最後の頁 19 ~ 24
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5702/massspec.S23-06	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Hongo Yayoi, Sekimoto Kanako	4. 巻 70
2. 論文標題 Interpretation of Mass Spectra_1	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Mass Spectrometry Society of Japan	6. 最初と最後の頁 274 ~ 279
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5702/massspec.S22-64	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Hongo Yayoi, Sekimoto Kanako	4. 巻 70
2. 論文標題 Acquiring MS Data	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Mass Spectrometry Society of Japan	6. 最初と最後の頁 202 ~ 208
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5702/massspec.S22-53	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 J. Liao, G.M. Wolfe, R.A. Hannun, J.M. St. Clair, T.F. Hanisco, J.B. Gilman, K. Sekimoto (24/35), et al.	4. 巻 21
2. 論文標題 Formaldehyde evolution in US wildfire plumes during the Fire Influence on Regional to Global Environments and Air Quality experiment (FIREX-AQ)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Atmospheric Chemistry and Physics	6. 最初と最後の頁 18319 ~ 18331
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5194/acp-21-18319-2021	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Z.C.J. Decker, S. Wang, I. Bourgeois, P.C. Jost, M.M. Coggon, J.P. DiGangi, K. Sekimoto (32/42), et al.	4. 巻 55
2. 論文標題 Novel Analysis to Quantify Plume Crosswind Heterogeneity Applied to Biomass Burning Smoke	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Environmental Science & Technology	6. 最初と最後の頁 15646 ~ 15657
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.est.1c03803	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Z.C.J. Decker, M.A. Robinson, K.C. Barsanti, I. Bourgeois, M.M. Coggon, J.P. DiGangi, K. Sekimoto (30/44), et al.	4. 巻 21
2. 論文標題 Nighttime and daytime dark oxidation chemistry in wildfire plumes: an observation and model analysis of FIREX-AQ aircraft data	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Atmospheric Chemistry and Physics	6. 最初と最後の頁 16293 ~ 16317
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5194/acp-21-16293-2021	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 L. Xu, J.D. Crouse, K.T. Vasquez, H. Allen, P.O. Wennberg, I. Bourgeois, K. Sekimoto (40/55), et al.	4. 巻 7
2. 論文標題 Ozone chemistry in western U.S. wildfire plumes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 未定
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.abl3648	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 G.A. Novak, C.H. Fite, C.D. Holmes, P.R. Veres, J.A. Neuman, I. Faloon, K. Sekimoto (18/35), et al.	4. 巻 118
2. 論文標題 Rapid cloud removal of dimethyl sulfide oxidation products limits SO ₂ and cloud condensation nuclei production in the marine atmosphere	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the National Academy of Sciences	6. 最初と最後の頁 e2110472118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.2110472118	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 M.A. Robinson, Z.C. Decker, K.C. Barsanti, M.M. Coggon, F.M. Flocke, A. Franchin, K. Sekimoto (19/26), et al.	4. 巻 55
2. 論文標題 Variability and Time of Day Dependence of Ozone Photochemistry in Western Wildfire Plumes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Environmental Science & Technology	6. 最初と最後の頁 10280 ~ 10290
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.est.1c01963	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 関本 奏子	4. 巻 63
2. 論文標題 質量分析におけるイオン化	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 食品衛生学雑誌	6. 最初と最後の頁 J-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ohnogi Suzuno, Sekimoto Kanako	4. 巻 56
2. 論文標題 Identification of Monoterpene Isomers by Collision-Induced Dissociation Mass Spectrometry (CID-MS)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Society of Cosmetic Chemists of Japan	6. 最初と最後の頁 395 ~ 401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5107/sccj.56.395	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nihill Kevin J., Coggon Matthew M., Lim Christopher Y., Koss Abigail R., Yuan Bin, Krechmer Jordan E., Sekimoto Kanako, Jimenez Jose L., de Gouw Joost, Cappa Christopher D., Heald Colette L., Warneke Carsten, Kroll Jesse H.	4. 巻 23
2. 論文標題 Evolution of organic carbon in the laboratory oxidation of biomass-burning emissions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Atmospheric Chemistry and Physics	6. 最初と最後の頁 7887 ~ 7899
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5194/acp-23-7887-2023	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Fujishima Shiho, Sekimoto Kanako, Takayama Mitsuo	4. 巻 12
2. 論文標題 Identification of Negative Ion at m/z 20 Produced by Atmospheric Pressure Corona Discharge Ionization under Ambient Air	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Mass Spectrometry	6. 最初と最後の頁 A0124 ~ A0124
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5702/massspectrometry.A0124	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nishikido Yuto, Sekimoto Kanako	4. 巻 12
2. 論文標題 Analysis of Volatile Esters and Alkanoic Acids by an Atmospheric Pressure Corona Discharge Ionization Collision-Induced Dissociation Mass Spectrometry in Positive-Ion Mode: Ionization, Fragmentation Patterns, and Discrimination between Isomeric Compounds	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Mass Spectrometry	6. 最初と最後の頁 A0127 ~ A0127
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5702/massspectrometry.A0127	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sekimoto Kanako, Coggon Matthew M., Gkatzelis Georgios I., Stockwell Chelsea E., Peischl Jeff, Soja Amber J., Warneke Carsten	4. 巻 57
2. 論文標題 Fuel-Type Independent Parameterization of Volatile Organic Compound Emissions from Western US Wildfires	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Environmental Science & Technology	6. 最初と最後の頁 13193 ~ 13204
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.est.3c00537	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Gkatzelis Georgios I., Coggon Matthew M., Stockwell Chelsea E., Sekimoto Kanako, Warneke Carsten, et al.	4. 巻 24
2. 論文標題 Parameterizations of US wildfire and prescribed fire emission ratios and emission factors based on FIREX-AQ aircraft measurements	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Atmospheric Chemistry and Physics	6. 最初と最後の頁 929 ~ 956
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5194/acp-24-929-2024	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Decker Zachary C. J., Novak Gordon A., Aikin Kenneth, Veres Patrick R., Neuman J. Andrew, Sekimoto Kanako, Brown Steven S., et al.	4. 巻 51
2. 論文標題 Airborne Observations Constrain Heterogeneous Nitrogen and Halogen Chemistry on Tropospheric and Stratospheric Biomass Burning Aerosol	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Geophysical Research Letters	6. 最初と最後の頁 G2023GL107273
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1029/2023GL107273	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Fukuyama Daisuke, Sekimoto Kanako	4. 巻 35
2. 論文標題 Functional Group Analysis of α -Pinene Oxidation Products Using Derivatization Reactions and High-Resolution Electrospray Ionization Collision-Induced Dissociation Mass Spectrometry	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of the American Society for Mass Spectrometry	6. 最初と最後の頁 728 ~ 737
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jasms.3c00415	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計6件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 関本 奏子
2. 発表標題 揮発性植物分子が作り出す大気環境とは？
3. 学会等名 日本植物学会 第86回大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 関本 奏子, Matthew Coggon, Georgios Gkatzelis and Carsten Warneke
2. 発表標題 Understanding of volatile organic compound emissions from western US wildfires
3. 学会等名 JpGU Geoscience Union Meeting 2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 関本 奏子, 福山 大輔, 猪俣 敏
2. 発表標題 高分解能衝突誘起解離質量分析法を用いたテルペン二量体の精密同定
3. 学会等名 第69回質量分析総合討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kanao Sekimoto, Yuto Nishikido, Toshio Hanada, Kazuhisa Uchiyama, and Katsuhiko Shiratake
2. 発表標題 Profiling of volatile ester isomers emitted from apple fruits by atmospheric pressure corona discharge ionization mass spectrometry
3. 学会等名 The 71th ASMS Conference on Mass Spectrometry (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kanao Sekimoto
2. 発表標題 Calculation of the sensitivity of proton-transfer reaction mass spectrometry (PTR-MS) for organic trace gases using molecular properties
3. 学会等名 The 9th Asia Oceania Mass Spectrometry Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 関本 奏子
2. 発表標題 PTR-MSによる植物由来揮発性有機化合物 (BVOC) の多成分リアルタイム計測
3. 学会等名 第65回日本植物生理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 関本 奏子, 大野木 涼乃	4. 発行年 2022年
2. 出版社 技術教育出版	5. 総ページ数 313
3. 書名 化粧品の新創製・処方・素材開発・解析評価技術と美容理論 「第30章 香りの構成要素分析 -CID-MS法によるモノテルペン異性体のリアルタイム識別-」	

〔産業財産権〕

〔その他〕

JST戦略的創造研究推進事業「さきがけ」の 新規研究課題採択について https://www.yokohama-cu.ac.jp/news/2021/202110sekimoto_lie_sakigake.html

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	入江 楽 (Irie Raku) (50835238)	横浜市立大学・理学部・助教 (22701)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------