

JMS-T100GC “AccuTOF GC”を用いた
FD 法によるイオン液体解析例

【はじめに】

イオン液体とは、アニオン及びカチオンから構成される『塩』であり、特に室温付近でも液体状態で存在する化合物のことをいう。イオン液体は、一般に不揮発性、不燃性、高極性、高導電性、高耐熱性などの特徴を併せ持ち、新しい機能性材料としての用途が期待されている化合物である。

今回JMS-T100GC“AccuTOF GC”にて、市販のイオン液体をFD法にて測定し、得られた質量スペクトルを用いて、その解析を試みたので報告する。

【試料及び条件】

試料

カチオン成分:ピリジン系

アニオン成分:フッ素系(トリフラート) から成るイオン液体

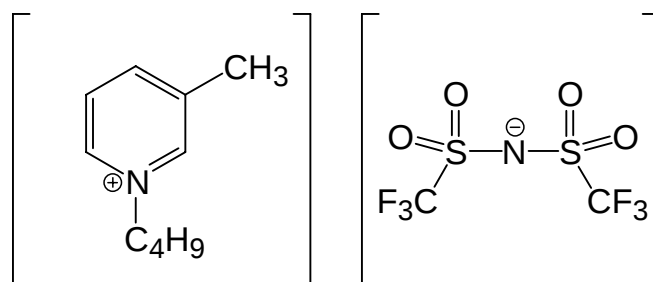


Fig.1 Structural formula of sample

MS 条件

MS:	JMS-T100GC “AccuTOF GC”
イオン化法:	FD(+)
	カソード電圧: -10 kV
	エミッタ電流: 0 mA → 51.2 mA/min → 35 mA
測定質量範囲:	m/z 35–800
スペクトル記録間隔:	1.0 sec

【結果及び考察】

FD法は通常ポジティブモードでの測定となるため、一般に塩を測定した場合、カチオン成分(以下C)は優勢に観測される。一方でアニオン成分(以下A)のみを検出することは難しい^{1), 2)}。またイオン性化合物では分子イオン(以下CA)の検出は難しく、通常CAにCが付加したCA+Cなどのカチオン付加分子($C_{n+1}A_n$)が観測されることが報告されている²⁾。Fig. 2 に得られたFD質量スペクトルを示す。

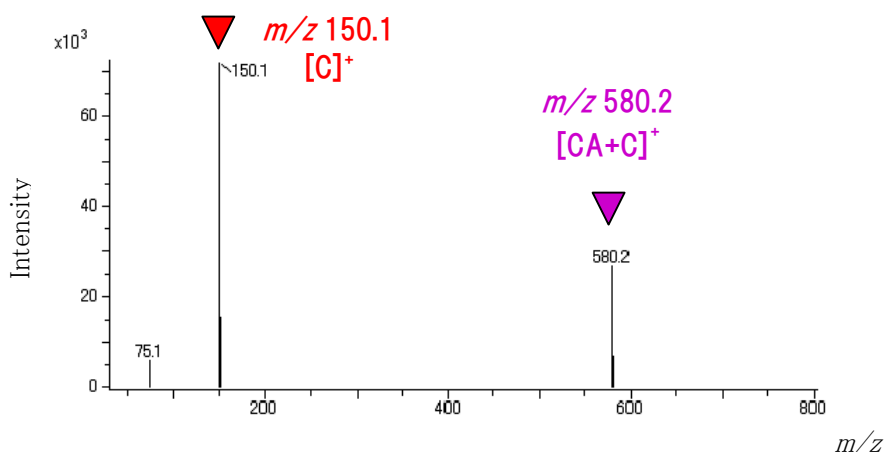


Fig.2 FD mass spectrum.

m/z 150.1 がベースイオンとして観測されており、次いで m/z 580.2 のイオンが観測されている。前者のイオンはカチオン(C)に相当すると考えられ、後者のイオンはカチオン付加分子(CA+C)に相当すると考えられる。これらイオンの精密質量測定を行った結果を Table 1 に示す。

Table 1 Accurate mass and calculated compositions of those ions.

Ionic species	Measured accurate mass	Calculated exact mass	Error (10^{-3} u)	Estimated formulae
C	150.1289	150.1283	0.6	$C_{10}H_{16}N$
CA+C	580.1766	580.1738	2.8	$C_{22}H_{32}F_6N_3O_4S_2$

C の組成と、CA+C の組成が推定されたので、A の組成は以下の式から求めることができる。

$$(CA+C) - 2 \times C = A$$

すなわち

$$A \text{ の組成式 } = (C_{22}H_{32}F_6N_3O_4S_2) - 2 \times (C_{10}H_{16}N) = C_2F_6NO_4S_2$$

となり、以上から A についても組成を推定することができた。

FD 法にてイオン性化合物を測定した場合、アニオン成分だけを観測することは難しいが、カチオン成分に加えてカチオン付加分子という特徴あるイオンを観測することができる。それらイオンの組成式から、アニオン成分を推定することが可能であり、イオン性化合物の解析に FD 法が有効であることが示唆された。

【参考文献】

- 1) J. H. Gross, "Mass Spectrometry", Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany (2004).
- 2) J. H. Gross, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **18**, 2254 (2007).
- 3) MS Tips / Application Note for DART No.D031 (<http://www.jeol.co.jp>)