



負イオン化学イオン化 GC/MS によるイソシアン酸類の分析

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 公開日: 2013-08-27 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 鈴木, 修, 服部, 秀樹, 浅野, 稔 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10271/1776

展18

負イオン化学イオン化 GC/MS によるイソシアン酸類の分析

鈴木 修, 服部 秀樹, 浅野 稔 (浜松医大)

負イオン化学イオン化質量分析 (NCIMS) 法は, 正イオン EI や CI 法とは全く異ったスペクトルを与えるばかりが多く, 法医毒物学の分野でも最近その有用性が高く評価されている。今回われわれはイソシアン酸類も電子親和性が高く, 比較的強い負イオンスペクトルを与えることを見出したので報告する。

イソシアン酸類は化学工業用材料として広く用いられており, 喘息様の呼吸器症状を発現させることが知られている。イソシアン酸類として, フェニルイソシアン酸, 1-ナフチルイソシアン酸, トルエン-2,4-ジイソシアン酸, プロピルイソシアン酸, ブチルイソシアン酸ならびにシクロヘキシルイソシアン酸を n-ヘキサンもしくはベンゼンに溶解し NCI GC/MS 測定に供した。反応ガスとしてメタン, 二酸化炭素ならびに笑気を用いた。一例としてフェニルイソシアン酸の負

イオンマスペクトルを図に示す。すべての物質に共通に NCO に相当する M/Z 42 に強いピークが検出された。メタンを反応ガスとして用いると, 脂肪族イソシアン酸類では M/Z $M+1$ の擬分子イオン, 芳香族イソシアン酸類では M/Z $M+1$ と $M-1$ の両方の擬分子イオンが出現した。笑気を反応ガスとして用いると M/Z $M+15$ と $M+30$ にピークが検出される。さらに二酸化炭素と笑気を用いたばかりにはすべての芳香族イソシアン酸において M/Z $M-12$ のピークが検出された。安定同位体である $^{13}\text{CO}_2$ と C^{18}O_2 を反応ガスとして用い, フラグメントイオンの生成のメカニズムを検討したところ, M/Z $M-12$ と $M+15$ のピークはそれぞれ $[M-\text{CO}+0]^-$ と $[M-\text{H}+0]^-$ に相当することが判明した。

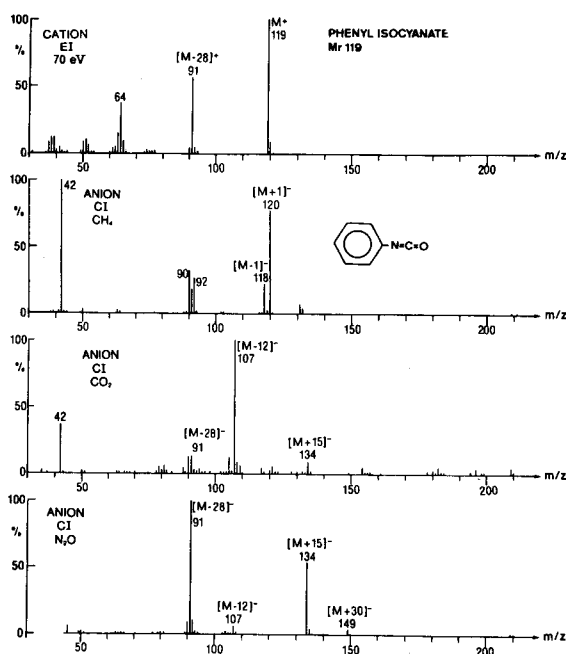


図 フェニルイソシアン酸の負イオンマスペクトル