

電解液中の変性物の精密解析 —Qtof型LC/MS/MS—

電解液を構成する溶媒や電解質および添加剤などは、サイクル試験により電解液中に各種の変性物が生成する。その変性物を Qtof 型 LC/MS/MS の精密質量測定により推定することができる。

▶ Qtof型LC/MS/MSとは

Q-TOF LC/MS/MS

- 精密質量と安定同位体パターンより未知化合物の組成式推定が可能
- MS/MS 測定により断片構造の組成式推定が可能

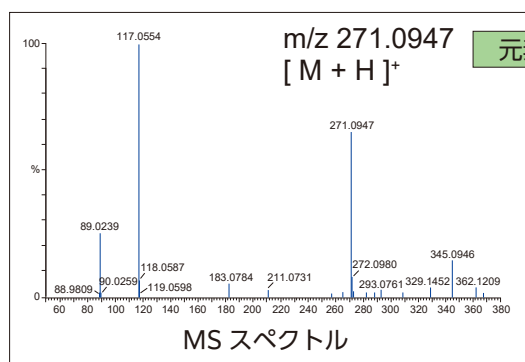
組成式	四重極型	Tof 型
C ₂₀ H ₉ ⁺	249	249.0700
C ₁₉ H ₇ N ⁺	249	249.0580
C ₁₃ H ₁₉ N ₃ O ₂ ⁺	249	249.1479

- ・ 四重極型では最も多く存在する同位体の質量を組み合わせる計算した整数質量のため、組成式の推定ができない
- ・ Tof 型では最も多く存在する同位体の精密質量を用いるため組成式推定が可能となる

➡ Tof 型は未知成分の組成式推定に適した LC/MS/MS

▶ Liイオン二次電池電解液の変性物分析事例

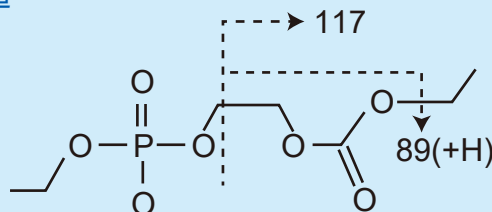
The Analysis of Converted Products of Electrolyte



元素組成解析

推定元素組成式
 $[C_9H_{20}O_7P]^+ = [C_9H_{19}O_7P+H]^+$
 分子式推定

推定構造



Chemical Formula: C₉H₁₉O₇P
 Exact Mass: 270.0868

(開裂イオンの帰属は一例として記載)

分子式、開裂イオンの組成式をもとにした構造推定が可能

※元素組成解析は候補元素を指定して行うため、解析には予め元素情報が必要

電解質 (LiPF₆) と溶媒 (カーボネート) が反応した変性物の存在が示唆された

