

各種材料中の LC/HRMS を用いた精密解析

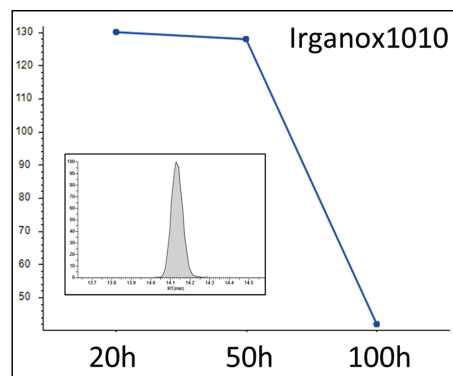
添加剤・分解物の分析

高分解能精密質量分析装置を用いることで、電池材料中の添加剤を精密に解析することが出来ます。LC/MS/MS、LC/HRMS を用いることで、サイクル試験により減少する化合物、あるいは生成される分解物を定量評価や分解物の構造推定が可能です。

<添加剤の定量分析>

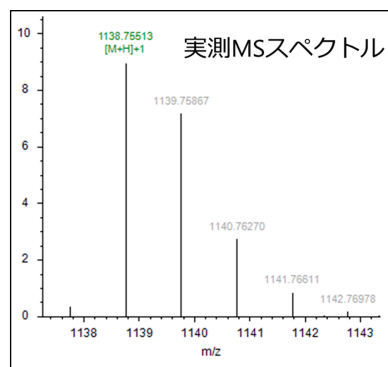
添加剤の対応化合物の一例

添加剤の例	CAS 番号	組成式
Irgafos168	31570-04-4	$C_{42}H_{63}O_3P$
Irganox1010	6683-19-8	$C_{73}H_{108}O_{12}$
TINUVIN328	25973-55-1	$C_{22}H_{29}N_3O$
Irgofos1790	40601-76-1	$C_{42}H_{57}N_3O_6$
ADEKA PEP-36	80693-00-1	$C_{35}H_{54}O_6P_2$
Tinuvin144	63843-89-0	$C_{42}H_{72}N_2O_5$
Trisotridecyl phosphite	77745-66-5	$C_{39}H_{81}O_3P$



添加剤の濃度プロットの一例

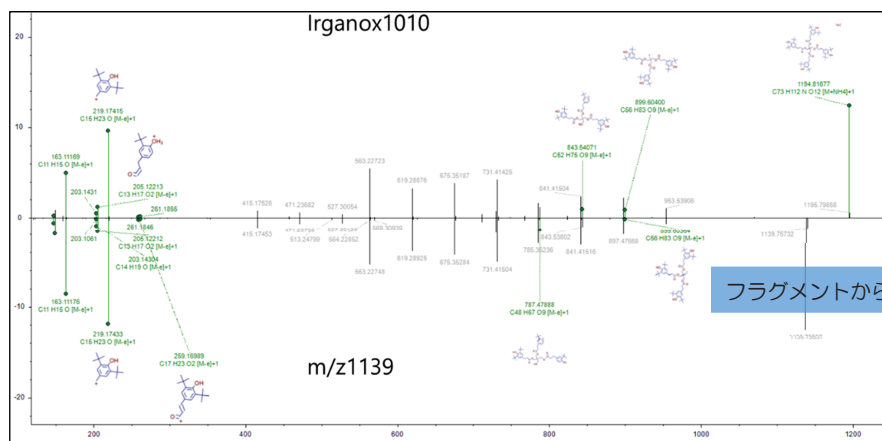
<分解物の精密解析>



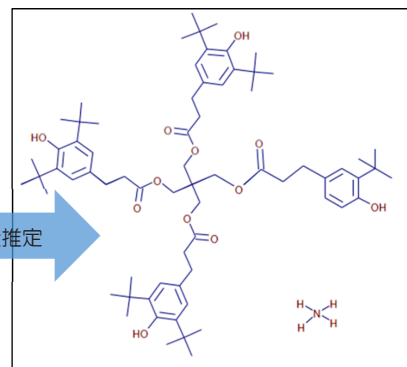
元素組成解析

質量	M	M+1	M+2	M+3
実測値	1138.755	1139.759	1140.763	1141.766
理論値	1138.755	1139.759	1140.762	1141.765
誤差ppm	<0.1	<0.1	0.1	0.1
強度	M	M+1	M+2	M+3
実測値	9	7.2	2.7	0.7
理論値	10	7.5	2.7	0.6
相対誤差%	—	6.7	11	30

推定組成式 $C_{69}H_{100}O_{12}$
(質量誤差 5ppm 以内、同位体比の相対強度 30%以内)



フラグメントから構造推定



サイクル試験により Irganox1010 の分解物 (m/z1139) が生成される可能性が示唆された。