

**【はじめに】** 樹脂用の可塑剤の一つであるリン酸クレジルジフェニルは『類似体の混合物(構造異性体を含む)』であり、組成式としては『 $(\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{O})_x\text{P}(\text{:O})(\text{OC}_6\text{H}_5)_y$ 』となります。化合物名から代表的な化学組成としては  $[x=1, y=2]$  の図1のような構造と推測されますが、実際、どのような類似体が混合しているかは規格表や MSDSでは確認できませんでした。

このような場合、ソフトイオン化法の一つである IAMS法を用いると、その化学組成と混合比を容易に推定することができます。

**【測定】** TICより購入したリン酸クレジルジフェニル (cas no. 26444-49-5)をトルエンに溶解して 1mg/mlの試験溶液を調製し、以下の条件で IAMS測定を行った。

装置: IA-Lab (キヤノンアネルバ(株)製, QMS型)

方法: 1mg/mLのリン酸クレジルジフェニル溶液の 1 $\mu$ Lを試料カップに分取し、直接導入プローブにより昇温測定を行う。

DIP昇温: 30 $^{\circ}$ C $\rightarrow$ [64 $^{\circ}$ C/min] $\rightarrow$ 280 $^{\circ}$ C(3min hold)

イオン源温度: 210 $^{\circ}$ C

イオン化室温度: 240 $^{\circ}$ C

SCANモード: (m/z) 10-1000, 分解能: 1, サイクルタイム: 2,500msec

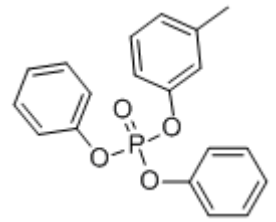


図1 リン酸クレジルジフェニル  $[x=1, y=2]$

**【結果】** 図2はリン酸クレジルジフェニルのマスペクトルと、そのマスキロマトグラムです。 $[x=1, y=2]$ にLiイオンが付加した擬分子イオンに相当するm/z 347が最も高強度に検出され、その前後に 14massずれた位置に3本のピークが確認され、それぞれの化学組成は、m/z 333;  $[x=0, y=3]$ 、m/z 361;  $[x=2, y=1]$ 、m/z 375;  $[x=3, y=0]$ であることが分かります。

また、IAMS法の場合、これらの類似体のイオン化効率や熱抽出効率がほぼ同じであるため、その組成比は各マスキロマトグラムのピーク面積から表1のように容易に類推できます。

表1 混合比の推定結果

組成式	MW	mol%	wt%
$[x=0, y=3]$	326	30	29
$[x=1, y=2]$	340	43	43
$[x=2, y=1]$	354	23	24
$[x=3, y=0]$	365	4	5

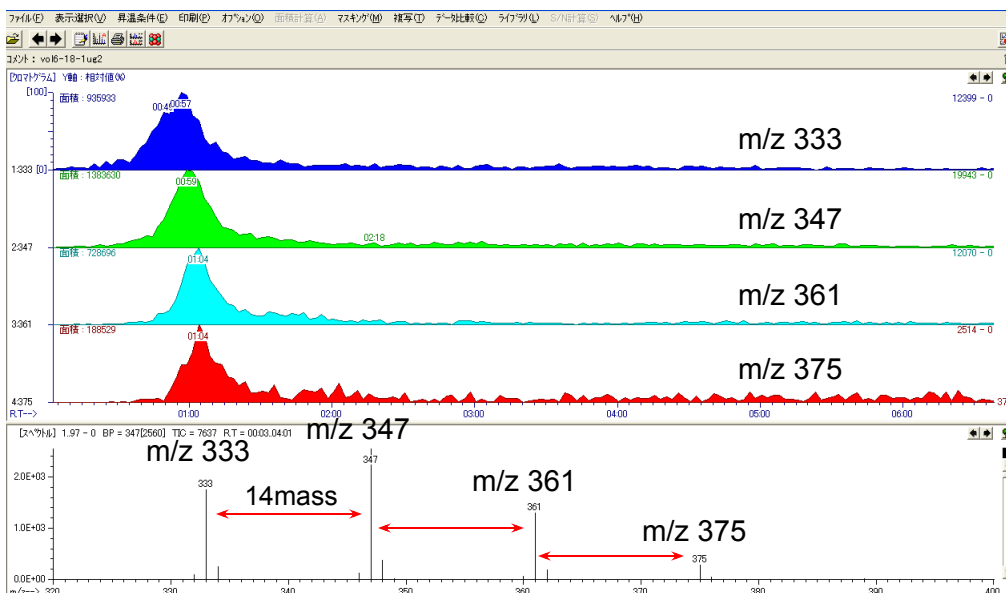


図2 IAMS測定結果  
(上段)マスキロマトグラム  
(下段)マスペクトル