

大気圧化学イオン化質量分析法による二次有機エアロゾルの既知組成分子の質量スペクトル

Atmospheric-pressure chemical ionization mass spectra of composition molecules of secondary organic aerosols

佐藤 圭 [1]

Kei Sato[1]

[1] 国環研

[1] NIES

http://www.nies.go.jp/asia/kenkyusha/sato_kei.html

[はじめに] 二次有機エアロゾル (SOA) は、植物や人間活動から排出される揮発性有機化合物の大気酸化で生成する。SOA による気候、健康及び視程への影響が懸念されている。SOA 組成は従来主にガスクロマトグラフ質量分析 (GC-MS) 法を用いて調べられてきたが、同定された組成は SOA の数% ~ 数十%に限られている。SOA 組成は酸化反応で生成する低揮発性の生成物なので、その分析には液体クロマトグラフ質量分析 (LC-MS) 法が適している。しかし LC-MS 法については、検出効率や質量スペクトルの情報が不足している。本研究では、LC-MS 法による SOA 分析の基礎情報を得るため、約 50 種類の既知組成について LC-MS 法による検出効率や質量スペクトルを調べた。

[実験方法] SOA 組成として知られる数十種のジカルボン酸類、オキソカルボン酸類、カルボニル類、フェノール類、及び酸無水物類を、大気圧化学イオン化法でソフトイオン化して分析した。幾つかの分子については、衝突誘起イオン化による解離イオンの測定も行い、イオンの解離過程を調べた。

[結果と考察] ジカルボン酸類及びカルボン酸類は陰イオン化モードで検出され、検出下限は 0.5 ~ 20 ng だった。カルボニル類は陽イオン化モードで検出され、検出下限は 1 ng 以上だった。しかし、検出下限が 20 ng を越えるものが多く、検出効率は陰イオン化モードのカルボン酸の場合に比べて概して低かった。官能基で修飾されないフェノール類については陰陽両イオン化モードについて検出下限が 20 ng を越えていたが、ニトロフェノール類は陽イオン化モードを使って 0.3 ~ 5 ng の検出下限で検出された。パラニトロフェノール類は陰イオン化モードでも陽イオン化と同程度の感度で検出されることが分かった。酸無水物類は、溶媒中で加水分解しジカルボン酸を生成した。酸無水物類については、加水分解を避けるためジブチルアミンで誘導体化して分析した。誘導体は陽イオン化モードを使ったとき 0.2 ~ 0.3 ng の検出下限で検出できた。講演では以上に述べた検出下限のデータと質量スペクトルの情報を基に各分子種のイオン化過程についても議論する。