

# 硝基化合物的大气压电喷雾电离质谱

张 敏 卢兴森 王继平 赵效文  
(西安近代化学研究所 西安 710065)

有机质谱是现代测定有机化合物分子结构最重要的工具之一,它与高效分离技术一气相色谱的在线联用(GC/MS)已成为复杂有机混合物分析最为有效的手段。这二种技术对于难挥发和热不稳定化合物以及大分子化合物的分析却受到很大限制。高效液相色谱与质谱联用(LC/MS)正弥补了这一缺陷。随着热喷雾、电喷雾、离子束等新接口技术的出现和发展,LC/MS技术已日臻完善。电喷雾电离(ESI)的原理是,将含待分析样品的液体泵入通过一个带有高电压的雾化室,形成带电荷的微滴,随着液滴的蒸发,样品的离子被抛射到气相,从而被大气压离子源质谱系统分析。整个过程是在常,温下进行的,所以特别适合难挥发和热不稳定样品的分析。电喷雾电离还能使具有寒电荷部位的化合物(如多肽类生物化合物)产生多电荷离子,这些多电荷离子的 $m/z$ 值如处在四极质谱的可检测质量范围,就可计算出化合物的分子量。电喷雾接口不仅可与高效液相色谱联用构成ESI-LC/MS/系统用于混合物的分析,而且可与柱塞泵进样系统连接用于直接进样分析。

硝基化合物是一类亚稳物质,受热时易发生分解。几十年来,国内外曾用常规的有机质谱和GC/MS技术分析和研究了一些硝基化合物类火炸药,但对那些熔点较高。难挥发的炸药(如耐热炸药)以及热敏感的炸药(如硝酸甘油类炸药)却束手无策。随着TC/MS技术的发展,已有火炸药分析方面的若干报导[1, 2, 3]。我们采用柱塞泵-大气压电喷雾电离-质谱的方法分析研究了耐热炸药PYX、芳香类炸药TNT、pA, 硝胺类炸药RDX、HMX、G7201和硝酸酯类炸药PETN等;并用大所太电喷雾电离-液相色谱-质谱联用技术分析了固体推进剂中优良增塑剂BTTN。

The mass spectra of TNT, HMX and PETN containing the groups of C-NO<sub>2</sub>, N-NO<sub>2</sub> and O-NO<sub>2</sub> were obtained. The factors including cap Ex vol and pH etc affecting the results were discussed. The binary mixtures BTTN/NG and HMX/RDX were isolated and determined by HPLC/ESIMS.

www.cnki.net