

●液晶組成物の構造解析

Structure Analysis of Liquid Crystal Compounds

TN070

【概要】

液晶ディスプレイ（LCD）に用いられる液晶組成物は、応答特などを向上させるため、10種類以上の成分からなる複雑な混合物です。しかしその構成成分の大部分は分子量500以下の有機化合物であり、ガスクロマトグラフィー（GC）を応用した各種手法での分析の適用が可能です。

以下に、市販製品のLCDに実際に用いられている液晶組成物の分析例を紹介します。

【方法】

液晶組成物の構造解析は、GC-MS、GC-IR、高分解能MS（HR-MS）を中心とするオンライン組成分析（第1ステップ）と、高速液体クロマトグラフィー（HPLC）による成分分取を行いNMR測定により解析する（第2ステップ）という、2段階に分けられます。前者は迅速に結果が得られ、主に微量試料の分析に、また後者はより精密な構造解析に適用されます。（Fig. 1）

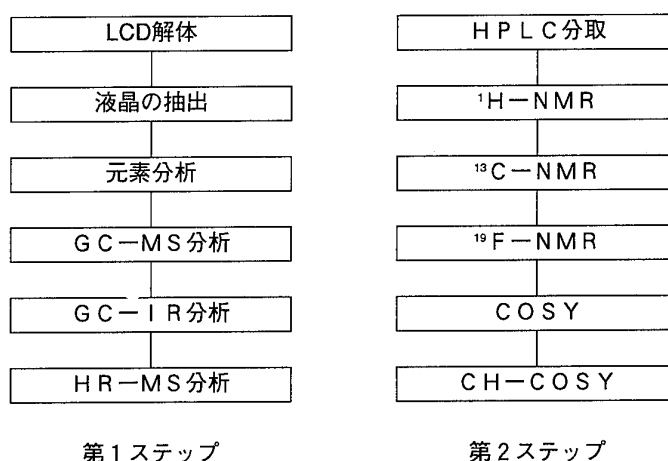


Fig. 1 Analytical flow scheme for LCD

【事例（1）】 オンライン組成分析（第1ステップ）による構造解析

ある液晶組成物についてGC分析を行ったところ、10成分が検出された。そのうち1成分（ピーク8）の分子式は、元素分析、GC-MS分析、HR-MS分析によりC₂₃H₃₄F₂であることが分かった。またMSスペクトルのフラグメントイオンから部分構造としてフェニル基、シクロヘキシル基の存在も確認された。

Fig. 2に MSスペクトルを示した。

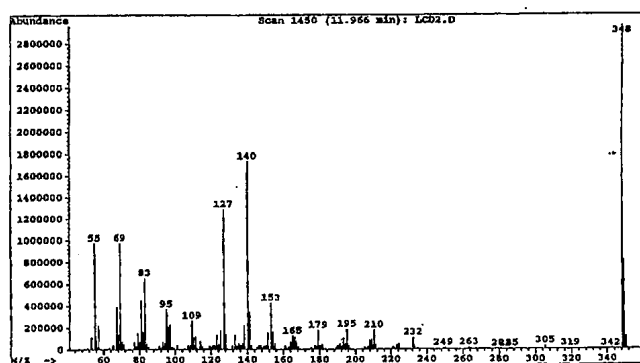


Fig. 2 GC-MS spectrum of peak 8

[事例 (2)] 第2ステップにおける構造解析

事例(1)に示したGCピーク8に対応する成分をHPLC分取し、その分取物のNMRスペクトル (^1H 、 ^{13}C 、 ^{19}F) を測定した。さらにCOSY (Fig. 4)、CH-COSY (Fig. 5) (いずれも2次元NMRスペクトル) を測定解析し、各部構造のつながり方に関する情報を得て、全体の精密な構造を明らかにすることができた。Fig. 6にGCピーク8の化合物の推定構造を示した。

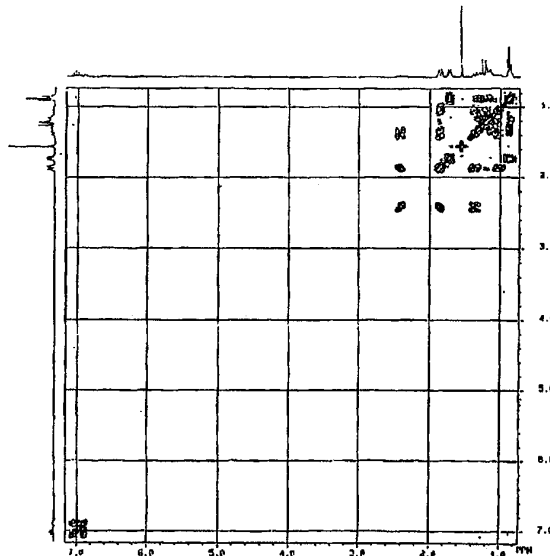


Fig. 4 COSY spectrum of peak 8

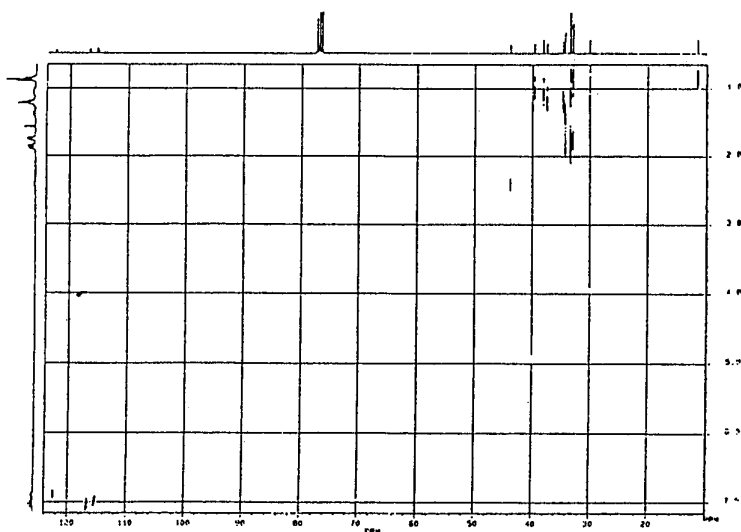


Fig. 3 CH-COSY spectrum of peak 8

ピーク⑧

$\text{C}_{23}\text{H}_{34}\text{F}_2$

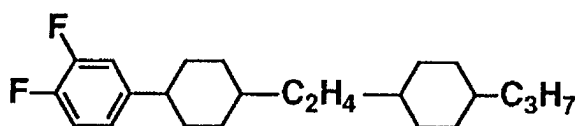


Fig. 4 Structure of peak 8