

●GC/TOF-MS を用いた液晶の構造解析

TN331

Structural analysis of liquid crystal compounds using gas chromatography / time of flight mass spectrometry

[概要]

液晶の構造解析には、GC/MS 法が広く用いられております。検出された成分がライブラリーに収載されている場合は、スペクトルパターンが一致する化合物を検索することによって構造を推定・同定することが可能です。しかしながら、ライブラリー検索で一致する化合物が見出せなかった場合は、フラグメントイオン等の情報に基づいて解析を行うこととなりますが、通常の GC/MS 測定から得られる整数質量のみでは解析が困難な場合があります。

当社では、GC/飛行時間 (time of flight、TOF と略) 型 MS を用いることにより、検出した各成分やフラグメントイオンの精密質量を取得することが可能です。そして、その精密質量に基づく組成式の情報から、ライブラリー検索では構造推定できなかった未知化合物についても、容易にその構造が推定できるようになります。

[事例]

市販の PC 用液晶ディスプレイから液晶パネルを取り出し、シール部分を精密切断してサンプリングした内部液晶成分の構造解析フローを以下に紹介致します。

1. GC/TOF-MS 分析

サンプリングした液晶成分の GC/TOF-MS 分析を行いました。イオン化法は電子イオン化 (Electron ionization、EI と略) 法です。得られた GC/TOF-MS 総イオンクロマトグラムを図 1 に示します。図 1 より、8 種前後の液晶由来成分が検出されました。

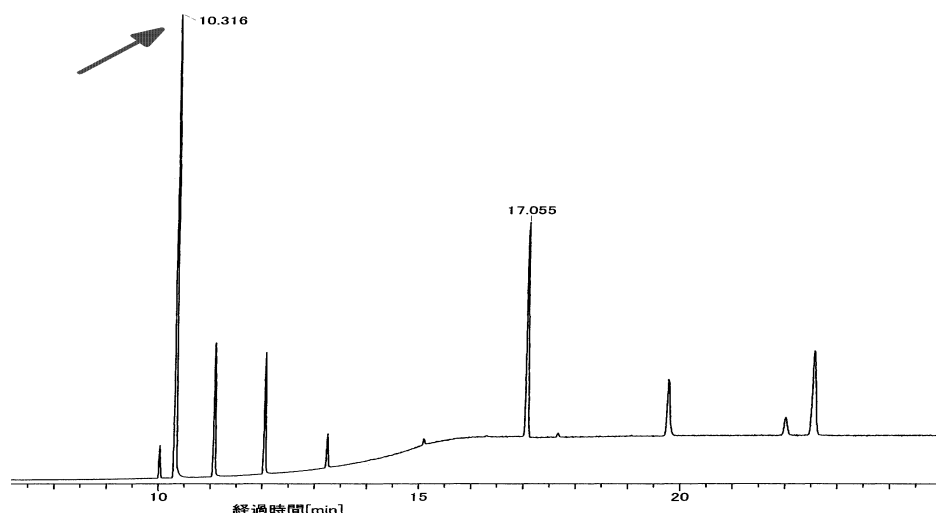


図 1 液晶成分の GC/TOF-MS 総イオンクロマトグラム

2. 解析

図1に矢印で示したピークのEIマススペクトル及び精密質量測定結果を図2に示します。

分子イオンピークとして m/z 211、フラグメントピークとして m/z 67 や m/z 129 等が検出されました。また、分子イオンピークとフラグメントピークの精密質量からそれぞれの組成式を推定しました。

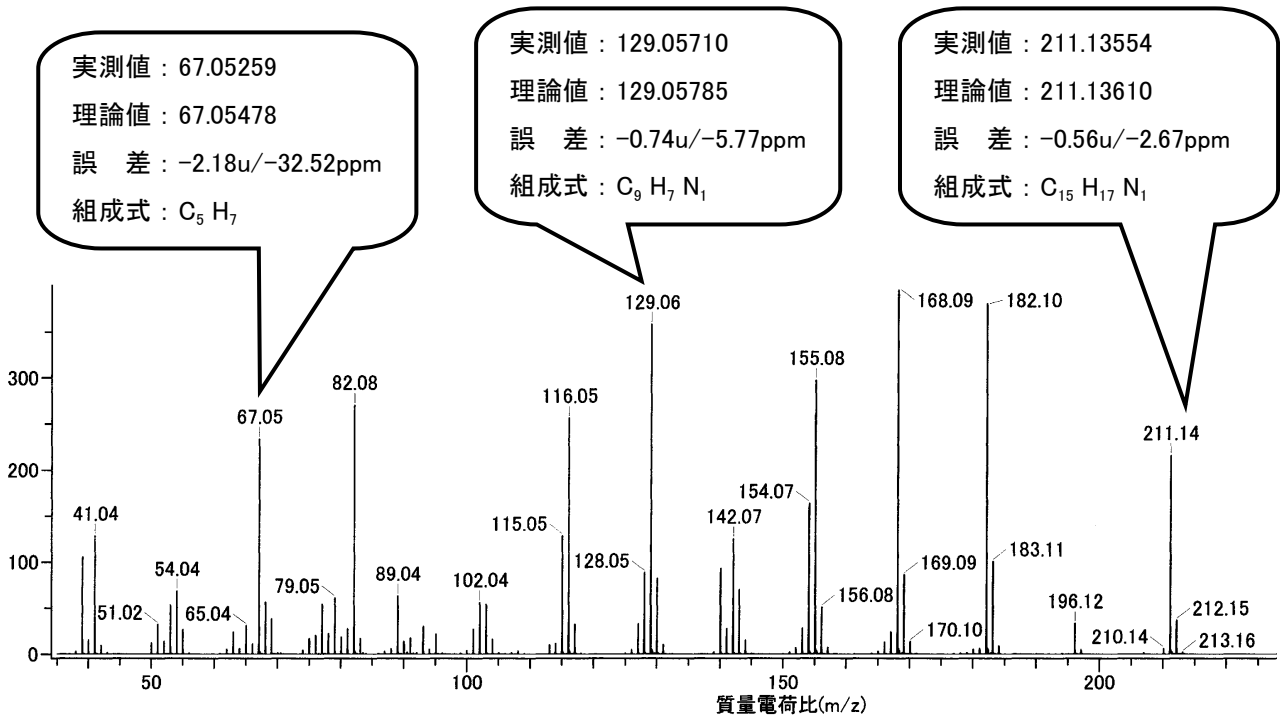
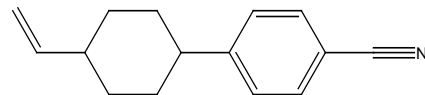


図2 液晶成分のEIマススペクトル及び精密質量測定結果

3. 結果

組成式情報と一般的な液晶成分の構造等を勘案し、図1に矢印で示したピークは以下の構造であると推定しました。



$C_{15}H_{17}N$
Exact Mass: 211.14
Mol. Wt.: 211.30
C, 85.26; H, 8.11; N, 6.63

図3 推定構造