

● 液晶組成物の構造解析

TN070

Structure Analysis of Liquid Crystal Compounds

[概要]

液晶ディスプレイ (LCD) に用いられる液晶組成物は、応答特性などを向上させるため、概ね 10 種類以上の成分からなる複雑な混合物です。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質量分析法 (GC-MS) や核磁気共鳴分光法 (NMR) による分析が可能です。

以下に、LCD で用いられている液晶組成物の分析例を紹介します。

[手法]

液晶組成物の構造解析では、GC-MS の精密質量測定による構造推定と、高速液体クロマトグラフィー (HPLC) で各成分を分取後、NMR により構造決定する手法が用いられます。前者は迅速に結果が得られることに加えて、微量な試料の分析に有用です。また後者は、より詳細な構造解析に適用されます。(Fig.1)

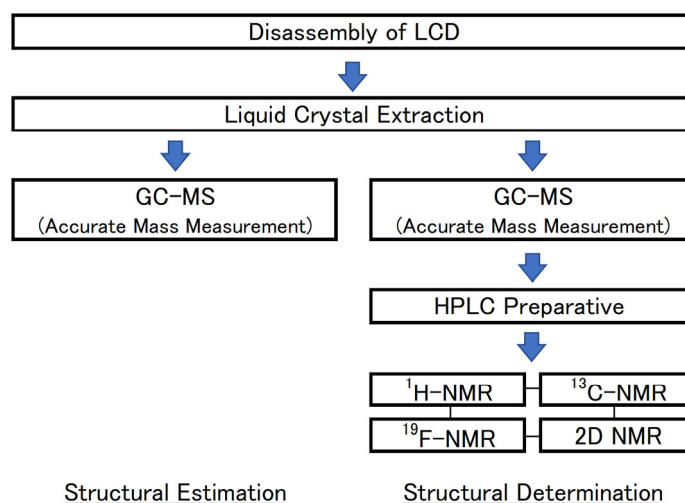


Fig.1 Analytical flow scheme for LCD

[事例]

(1) GC-MS(精密質量測定)による液晶成分の構造推定

液晶の GC-MS を行ったところ、全 10 成分が検出されました。この中の 1 成分の結果を例に挙げます。

当該成分のマスペクトルから、分子イオンとして m/z 332 を検出しました。この精密質量から、分子式は $C_{21}H_{23}F_3$ であることが分かりました。また、フラグメントイオンの解析も合わせた結果、部分構造としてフェニルプロピルシクロヘキサンを有することが推定されました。

Fig.2 にマスペクトルと解析結果を示します。

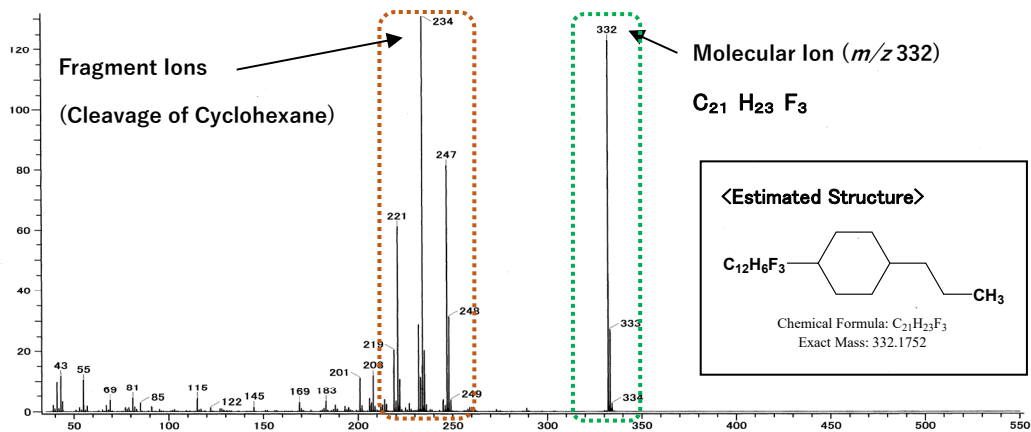


Fig.2 GC-MS Spectrum

(2) NMR 分析による液晶成分の構造決定

事例(1)で示した成分を HPLC で分取し、その分取物の NMR 測定 (^1H 、 ^{13}C 、 ^{19}F 、各種 2 次元(DQF-COSY (Fig.3)、HSQC (Fig.4))) を実施しました。解析の結果、原子の配列に関する情報を得ることができ、事例(1)の成分の構造決定を行うことができました。Fig.5 にその構造式を示します。

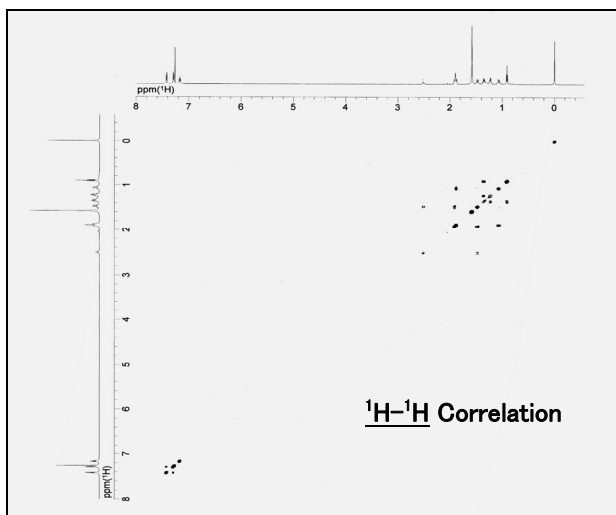


Fig.3 DQF-COSY Spectrum

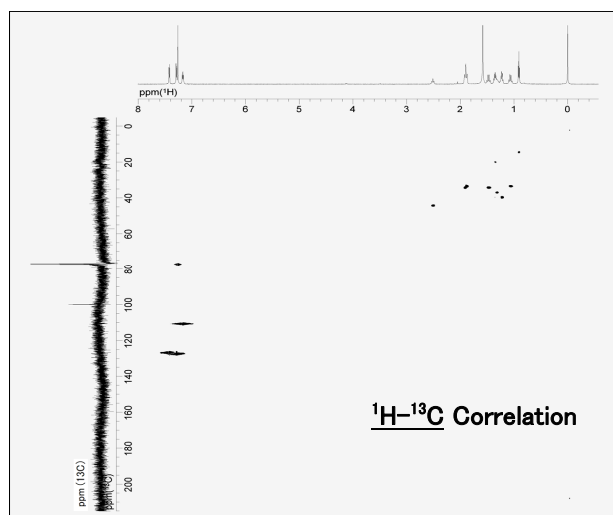


Fig.4 HSQC Spectrum

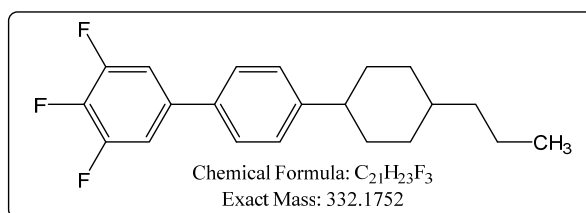


Fig.5 Structure

このように、当社では液晶由来の未知成分の構造解析を、様々な手法を組み合わせることで明らかにすることができます。本技術は液晶以外の製品や材料にも適応できますので、お困りごとがございましたら、お気軽にご相談ください。

[キーワード] 液晶材料、劣化原因、キャラクタリゼーション、液晶デバイス、高分子液晶