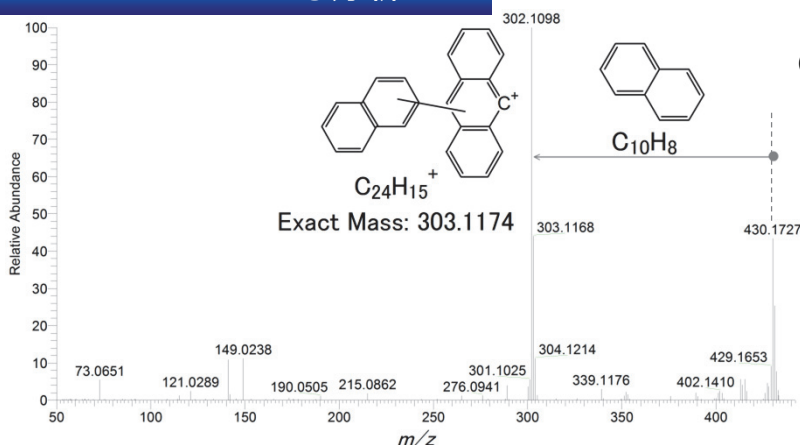


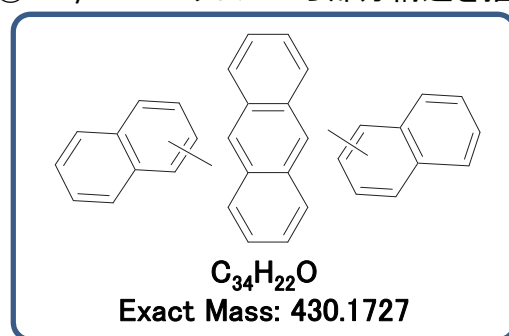
有機EL材料の構造解析

高分解能LC/MS/MSと高分解能2次元NMRを用いて、有機EL材料の構造解析を行った。LC/MS/MS測定からは有機EL材料の元素組成と部分構造の情報が得られ、2次元NMR測定を行うことで置換位置まで含めた詳細な構造推定が可能であった。本試料は*anti*体、*syn*体の異性体混合物であったが、これらを区別し、存在比率まで求めることができた。

LC/MS/MSによる分析



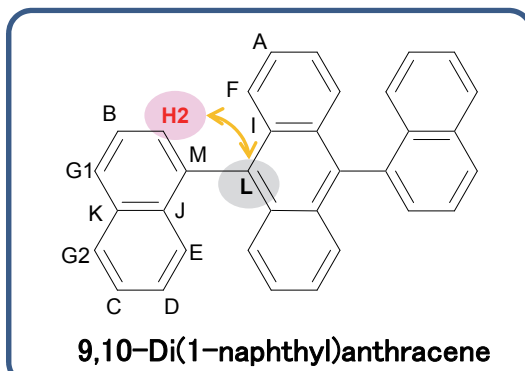
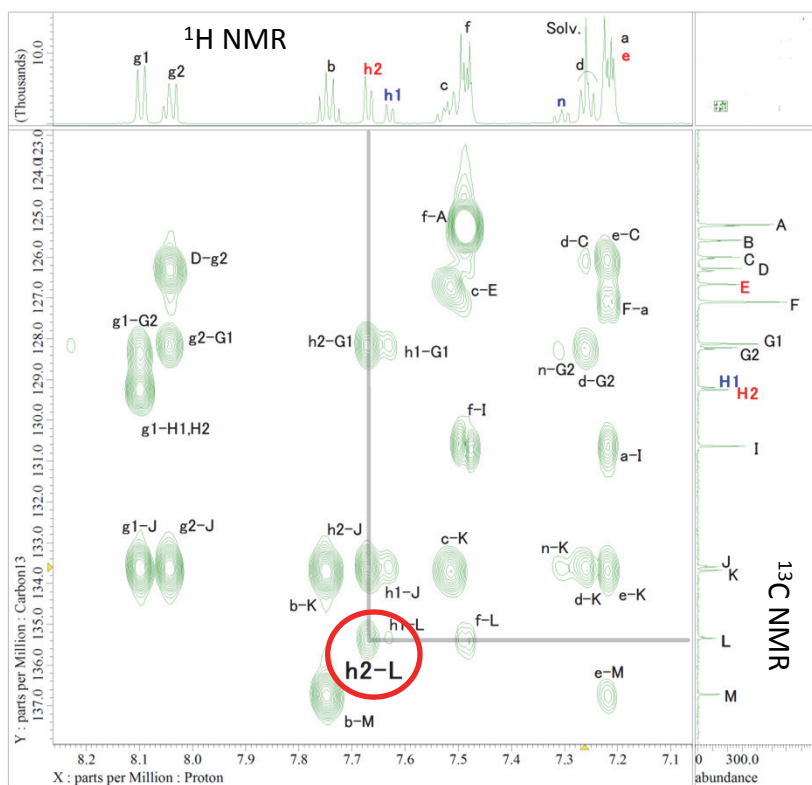
- ① 精密質量測定により各イオンの元素組成を求める
- ② MS/MSスペクトルから部分構造を推定



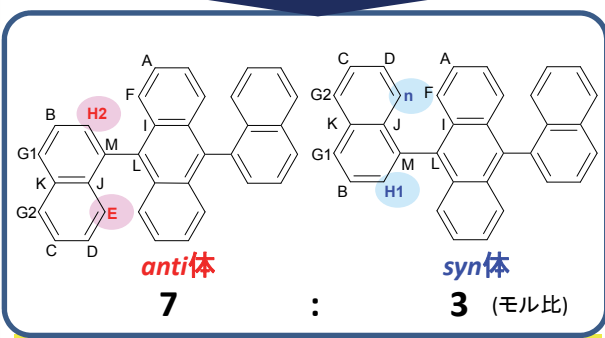
構成ユニットの情報が得られる

2次元NMRによる分析

2~3結合離れて位置する¹Hと¹³Cの位置関係を解析



置換位置を含めた構造推定が可能



*anti*体と*syn*体の存在比率算出が可能

有機EL材料の置換位置を含めた構造解析が可能である