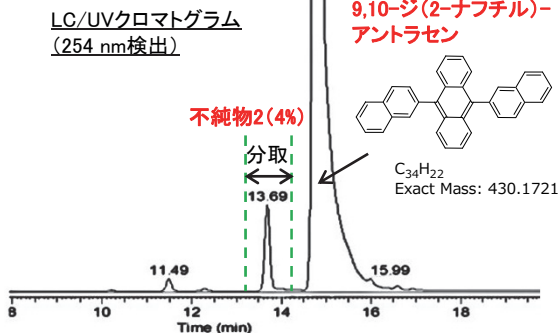


高感度NMRを用いたOLED材料中 微量不純物の構造解析

有機EL材料中の原料不純物や劣化成分などは微量でもディスプレイの耐久性や均一性に悪影響を及ぼす可能性があるため、こういった構造の不純物が含まれるかを調べることは重要である。今回、有機ELデバイス中の不純物や劣化物の詳細構造解析を目的とし、有機EL材料中の微量成分の精製と、高分解能MSおよび高感度NMRによる構造決定を試みた。

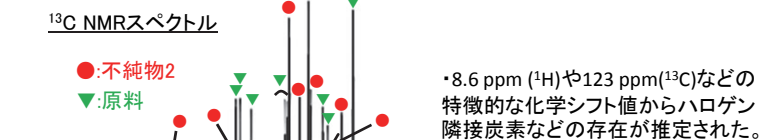
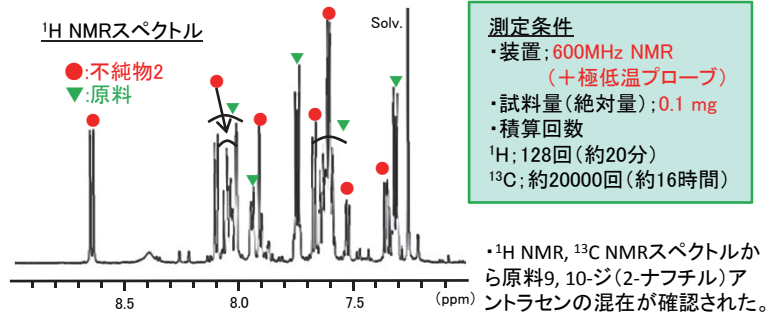
LC分取

・9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン原料のLC分取

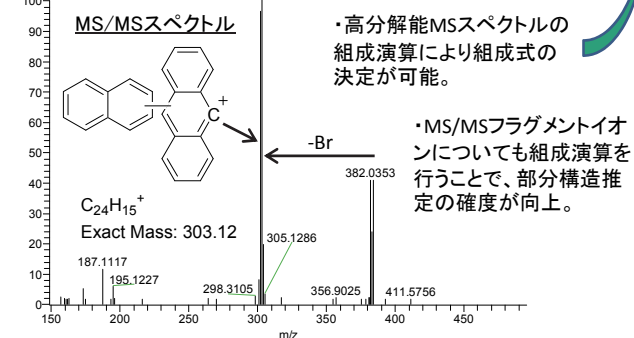
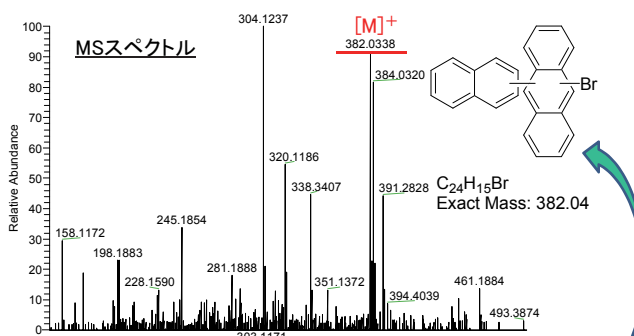


■分取量
注入量: 0.5 mg × 60回 → 不純物2の回収量は0.6 mg

一次元NMR分析結果

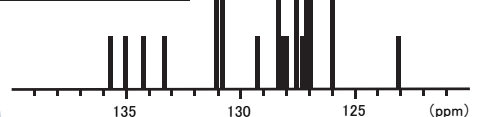


LC/MS分析結果



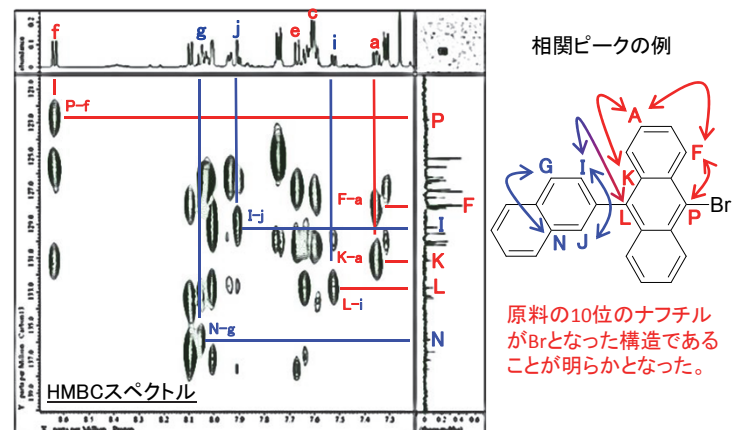
ただし、MSでは置換基位置を決定することは困難。

NMR Predict*による
推定構造のスペクトル予測
(*Modgraph Consultants社
スペクトル予測ソフト)



・スペクトルの予測計算は、部分的に合致する場合もあるが、全てのピークを完全に帰属することは困難。

二次元NMR分析結果



まとめ

LC分取により試料中の数%の微量不純物を回収することができた。また、得られた不純物の高分解能MSによる組成演算やフラグメントイオン解析から構造を推定することができた。さらに、高感度NMRによる二次元NMRを含めた解析を行うことで、微量成分に対しても置換位置を含めた化合物の詳細構造を決定することができた。