

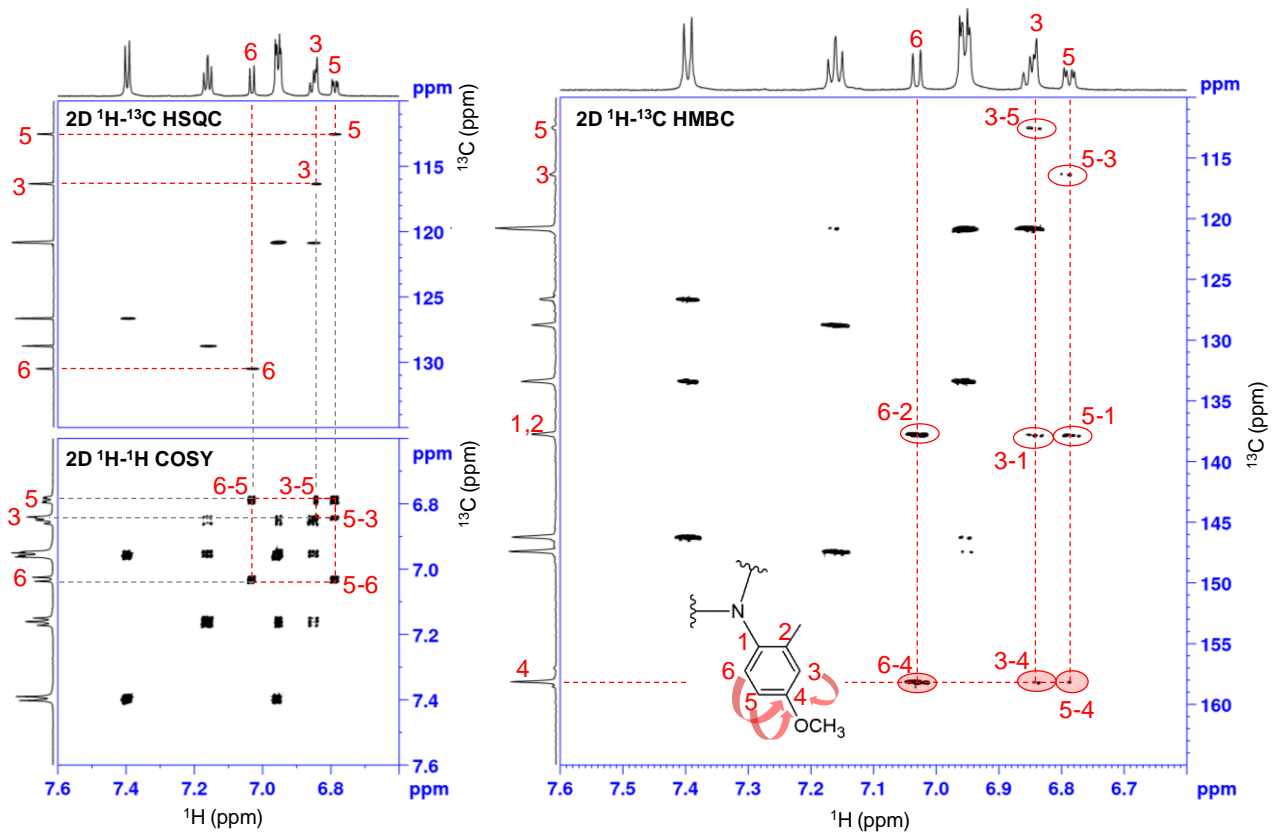
【技術資料】高磁場 NMR による微量(10 μ g)有機 EL 材料の分子構造解析

概要

近年、高感度プローブの開発や高磁場装置の開発が進み、NMR を用いたより微量な有機化合物の解析が可能となってきています。弊社では 1.7mm 極低温プローブを装着した 700MHz NMR を導入し、各種 2 次元 NMR スペクトルに基づく微量な有機化合物(～10 μ g 程度)の分子構造解析が可能となりました。本技術資料では、微量有機化合物の分子構造解析の事例として、10 μ g 有機 EL 材料の分子構造解析をご紹介します。

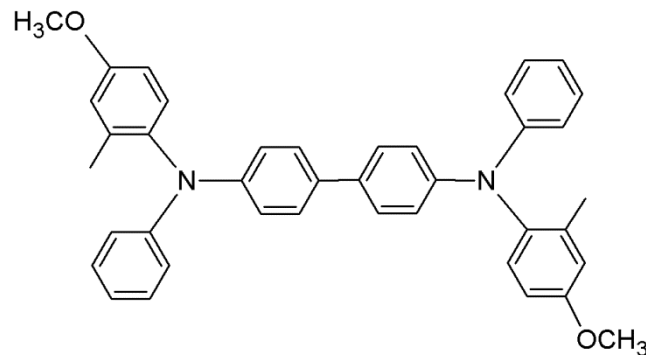
分析事例

有機 EL 材料は近年、高精細な 4K ディスプレイ等に使用されるなど注目されています。その発光色、発光強度や寿命は分子構造に依存することから、分子構造の把握が重要です。1.7mm 極低温プローブを装着した 700MHz NMR により、10 μ g の有機 EL 材料でも高感度、高分解能な 2 次元 NMR スペクトルを 4 日程度で測定でき、詳細な分子構造解析ができました(図 1)。



【図 1】有機 EL 材料(10 μ g)の各種 2D NMR スペクトル

各種 2 次元 NMR スペクトルの解析によって得られた有機 EL 材料の分子構造を図 2 に示します。このように、10 μ g の微量な有機 EL 材料でも詳細な分子構造解析が可能となりました。



【図 2】有機 EL 材料(10 μ g)の分子構造解析結果

ここで 10 μ g の有機 EL 材料は、膜厚を 100nm と仮定すると 1cm 四方の量に相当します。分取 HPLC と併用することにより、複層の膜で機能する有機 EL パネルについて、構成する有機 EL 材料それぞれの分子構造解析が可能となります。

また、本技術は他の微量有機化合物全般への適用が可能です。製品や生体試料から HPLC 等により分取した微量有機化合物の分子構造と機能の相関解析が期待されます。

適用分野：有機 EL 材料、微量有機化合物

キーワード：700MHz NMR、1.7mm 極低温プローブ、有機 EL 材料、微量有機化合物、
2D ^1H - ^{13}C HSQC、2D ^1H - ^{13}C COSY、2D ^1H - ^{13}C HMBC