

● 액정 조성물 구조해석

SCAS_TN070KK

Structure Analysis of Liquid Crystal Compounds

[개 요]

액정 디스플레이 (LCD)에 사용되는 액정 조성물은 반응특성 등을 향상하기 위해 10종류 이상의 성분으로 구성된 복잡한 혼합물입니다. 하지만 그 구성 성분의 대부분은 분자량 500이하인 유기 화합물이고, 가스 크로마토그래피 (GC)를 응용한 각종 방법으로 분석 적용이 가능합니다. 하기에서 시판 제품 LCD에 실제로 사용된 액정 조성물 분석 예를 소개합니다.

[방 법]

액정조성물 구조해석은 GC-MS, GC-IR, 고분해능MS (HR-MS)를 중심으로 한 온라인 조성분석(제1단계)와 고속액체 크로마토그래피 (HPLC)에 의한 성분을 추출하여 NMR측정으로 해석하는(제2단계) 두가지 단계로 나뉘집니다. 제1단계로는 신속하게 결과를 얻을 수 있어서 주로 미량 시료 분석에 적용되며, 또한 제2단계는 더 정밀한 구조 해석에 적용됩니다. (Fig. 1)

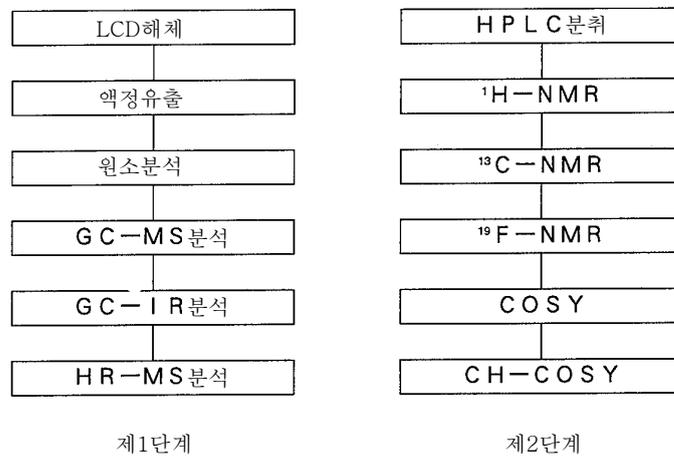


Fig.1 Analytical flow scheme for LCD

[사례 (1)] 온라인 조성분석(제1단계)을 통한 구조해석

특정 액정조성물에 대해 GC 분석을 진행한 결과 10 성분이 검출되었다. 그 중 1 성분(픽 8) 분자식은 원소분석, GC-MS 분석, HR-MS 분석으로 $C_{23}H_{34}F_2$ 인것으로 나타났다. 또한 MS 스펙트럼 프래그먼트이온에서 부분 구조로서 페닐기, 시클로헥실기 존재도 확인이 되었다. Fig. 2 에서 MS 스펙트럼을 나타낸다.

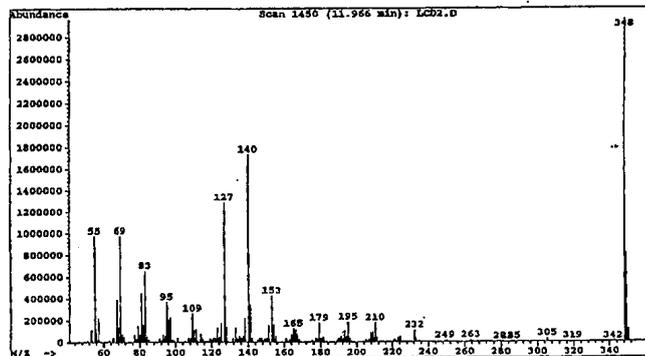


Fig.2 GC-MS spectrum of peak 8

[사례 (2)] 제2단계인 경우의 구조해석

사례 (1)에 나타난 GC픽8에 대한 성분을 HPLC 분취하고, 그 분취물 NMR스펙트럼 (^1H , ^{13}C , ^{19}F)을 측정했다. 또한 COSY (Fig. 4), CH-COSY (Fig. 5) (모두 2차원 NMR스펙트럼)을 측정 해석하고, 각부 구조의 연결 상태에 관한 정보를 얻어 전체적으로 정밀한 구조를 밝히게 되었다. Fig. 6에서 GC픽8의 화합물의 추정 구조를 나타낸다.

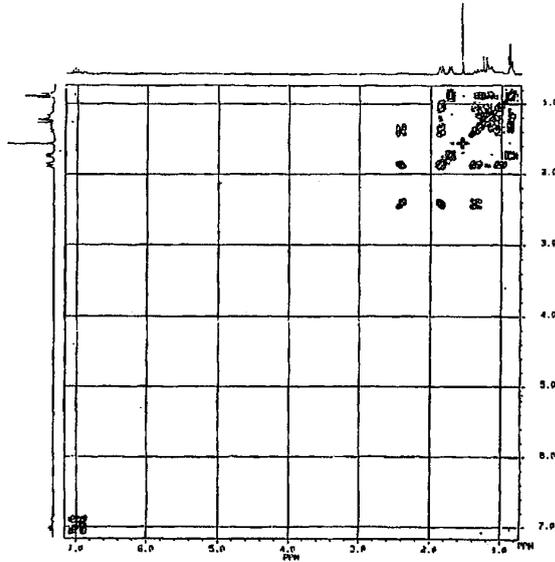


Fig. 4 COSY spectrum of peak 8

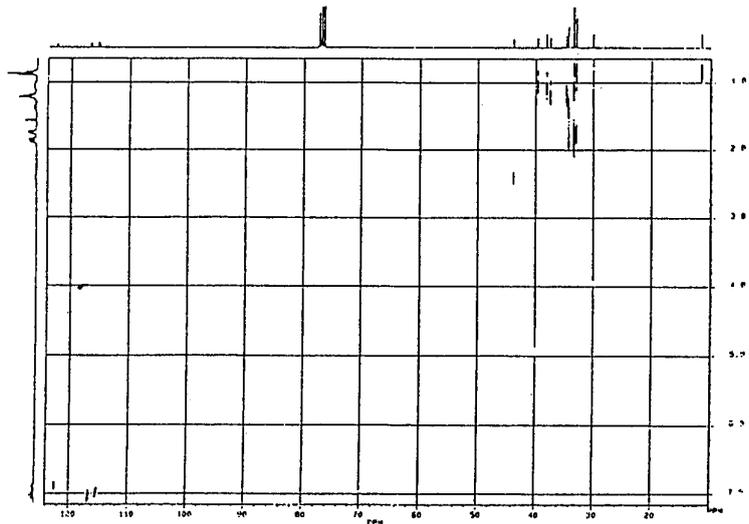


Fig. 3 CH-COSY spectrum of peak 8

Peak ⑧

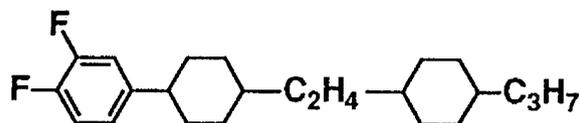


Fig. 4 Structure of peak 8

※이 검사는 주식회사 스미카분석센터 (<https://www.scas.co.jp/en/>)에서 실시됩니다.

취급점 :

SCAS Korea

당사 홈페이지

<https://www.scaskorea.co.kr/>

문의처

<https://www.scaskorea.co.kr/contact/>

기술사례

<https://www.scaskorea.co.kr/technical-informations/>