

MALDI-TOFMSを用いたMS/MS分析による工業材料の構造解析01 - 有機EL用ポリマーの解析 -

Structural analysis of industrial material by MALDI-MS/MS 01 - Analysis of the polymer for OLED -

MALDI-TOFMSによる分析は、各種工業材料の構造解析法の一つとして広く用いられています。MALDI-TOFMS分析からポリマーの繰返し単位の質量や両末端残基に関する情報が得られますが、部分構造に関する情報はあまり得られませんでした。高エネルギー衝突誘起解離（高エネルギーCID）を特徴とするMALDI-TOFMS装置を用いて、有機EL用ポリマーにMS/MS分析を適応し、特定イオンのプロダクトイオンのマススペクトルにより構造解析を行った事例をご紹介します。

有機ELディスプレイの発光層には低分子型と高分子型

があり、高分子型は大型化、フレキシブル化が可能のため、今後の開発動向が注目されています（Fig.1）。高分子型には長い共役系を有する特異な構造のポリマーが使用されることが多く、NMR分析や熱分解GC/MS分析を駆使しても完全な構造決定は難しいので、MALDI-TOFMSによるMS/MS分析の併用が有効です。Fig.2に発光層用ポリマーのマススペクトルを示しました。

T. Nishine

（分析事例ご提供：

（株）東レリサーチセンター 佐藤信之様、田口嘉彦様）

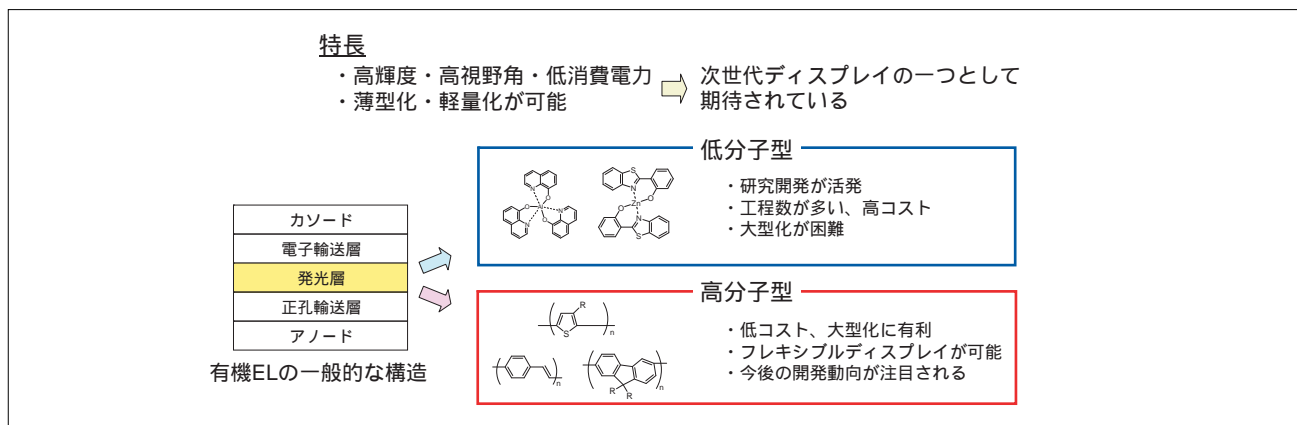


Fig.1 有機ELディスプレイの概要
Outlines of OLED display

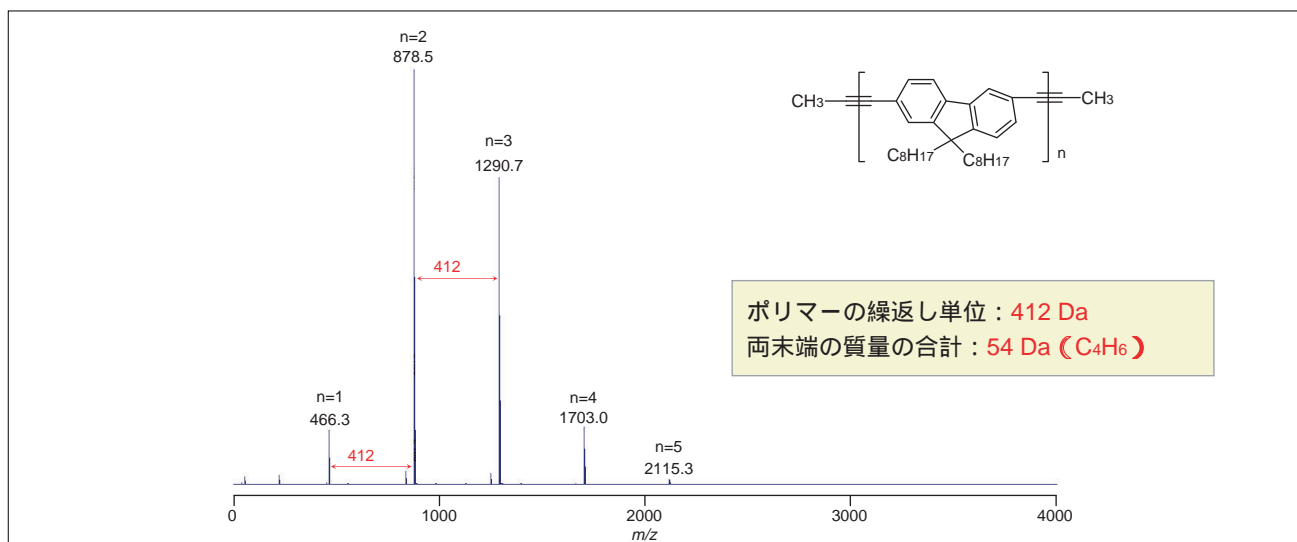


Fig.2 有機EL用ポリマーのマススペクトル
Mass spectrum of the polymer for OLED

発光層用ポリマーの繰返し単位の質量に相当する412Daの他に両末端質量の合計が54Daであることが分かりました。Fig.3に m/z 1291 (3量体)の分子イオンをプリカーサーイオンとしたMS/MSスペクトルを示しました。側鎖のオクチル基脱離に相当する112, 113間隔のピークが6つ観測されました。同様に m/z 1704 (4量体)をプリカーサーイオンとしたMS/MS分析ではFig.4に示すように8個のオクチ

ル基の脱離が確認され、繰返し単位中にオクチル基が2個含まれることが明らかになりました。

高エネルギーCID法によるMALDI-MS/MS分析は、従来のPSD法と比較して部分構造を反映した多くのプロダクトイオンが生成するため情報量が豊富で解析しやすく、有機EL用ポリマーについて、側鎖の構造を調べることができました。

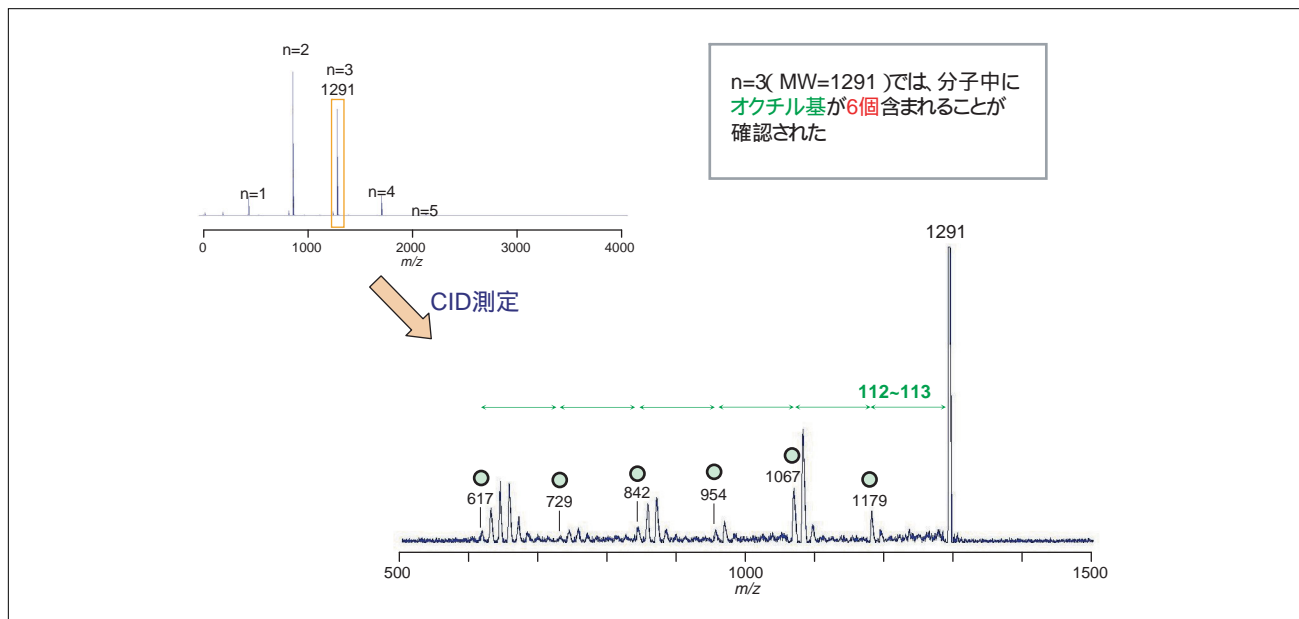


Fig.3 m/z 1291($n=3$)をプリカーサーイオンとしたMS/MSスペクトル
MS/MS spectrum of m/z 1291 ($n=3$) as a precursor ion

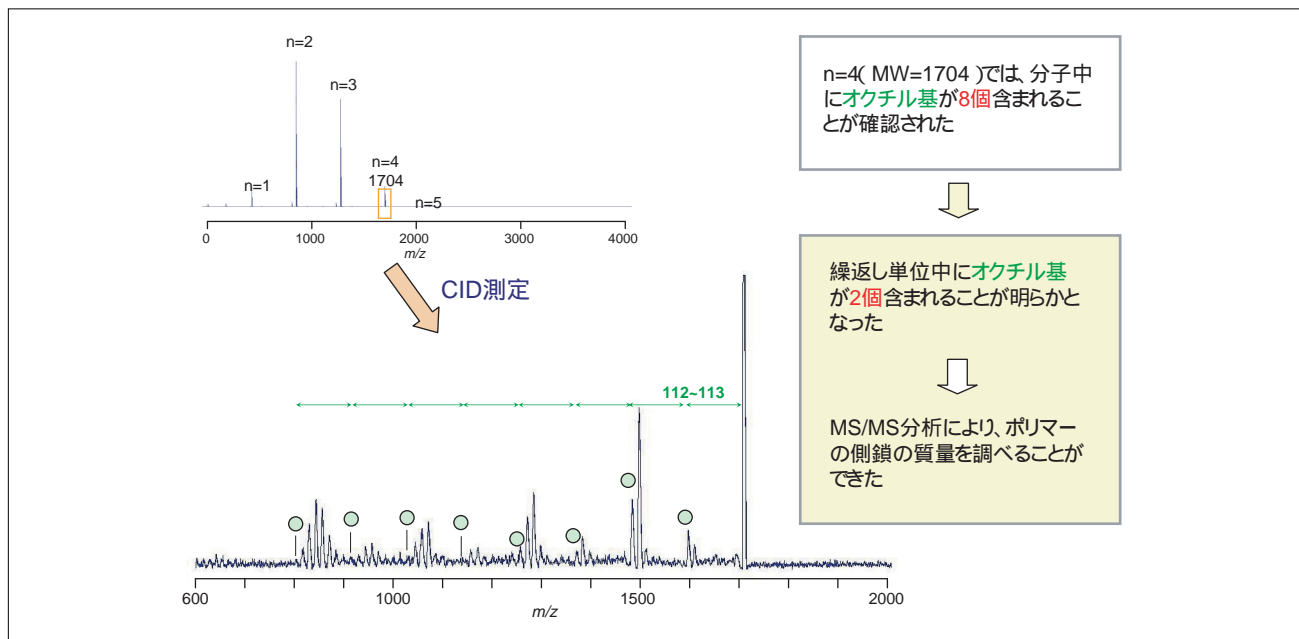


Fig.4 m/z 1704($n=4$)をプリカーサーイオンとしたMS/MSスペクトル
MS/MS spectrum of m/z 1704 ($n=4$) as a precursor ion

[参考文献]

田口嘉彦, 大槻亜紀子, 佐藤信之; 第10回高分子分析討論会要旨集, p95 (2005)

初版発行: 2009年1月

島津製作所 分析計測事業部
応用技術部

島津分析コールセンター

● 0120-131691(携帯電話不可)
● 携帯電話専用番号(075)813-1691

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。改訂版は下記の会員制Web Solutions Navigatorで閲覧できます。
<https://solutions.shimadzu.co.jp/solnavi/solnavi.htm>

会員制情報サービス「Shim-Solutions Club」にご登録ください。
<https://solutions.shimadzu.co.jp/>
会員制Webの閲覧だけでなく、いろいろな情報サービスが受けられます。