Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

针对有机EL相关材料的解决方案

有机EL单体的结构

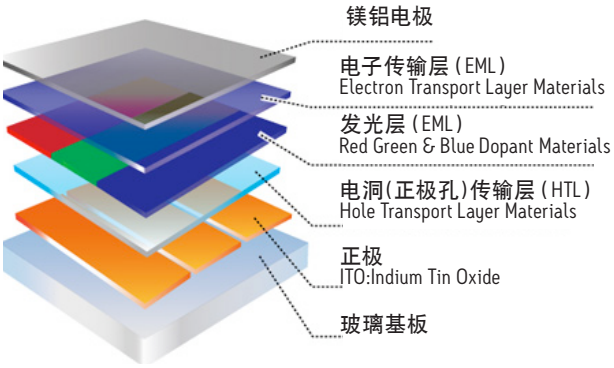


图1. 有机EL粒子的简略图。

有机EL单体的基本结构如图1所示，是由阳极和阴极夹着一个有机发光层(EML)组成的结构。为使EML的发光向外部传送，阳极上使用了上表层封锡的氧化铟透明电极(ITO)。EML已有单层和多层结构的专利申请，多层结构的EML每一层都有各自的功能。上图为三层式结构，是由负极的电子传输层(ETL)、EML、电洞传输层(HTL)构成的。加上电场后通过阳极(正极)的电洞注入来自阴极(负极)的电子，在EML上它们相结合时产生的能量激发发光中心的荧光有机化合物发光。为此，要开发高亮度且高效的发光单体，对EML需要来自两个载体的电洞取得平衡，和电子的注入。而且，该发光层使用的有机分子大致分为低分子和高分子两类。

有机化合物的发光原理（荧光与磷光 ）

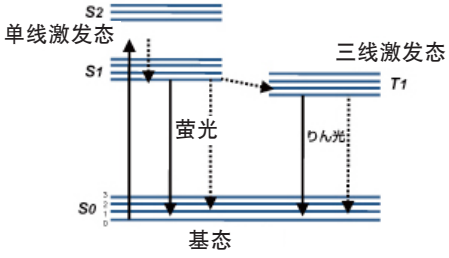
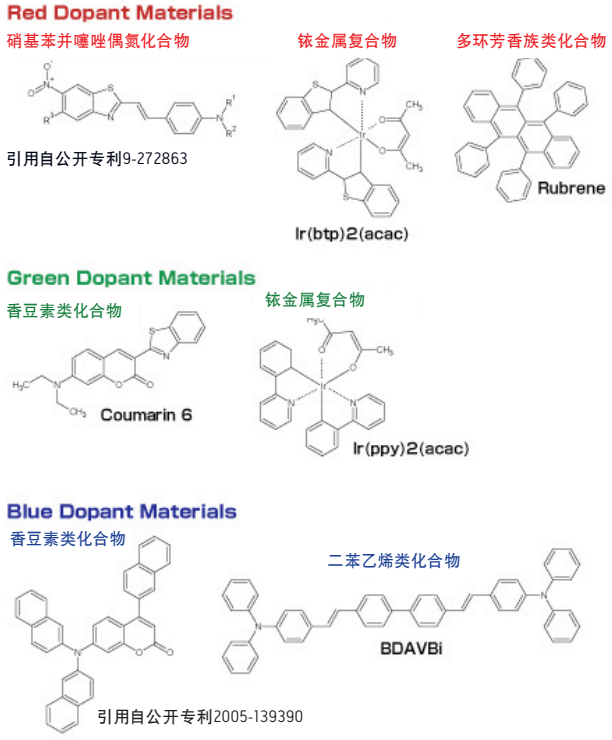


图2. 雅布伦斯基图。

图2是显示带有芳香环化合物能量状态的雅布伦斯基图。S0表示基态，S1为第一单线激发态，S2为第二单线激发态，T1为三线态。在辐射迁移过程中，当化合物被过剩的能量激发，向低能态（稳定的基态）转移时，化合物就会发光。从第一单线激发态向基态迁移时的发光被定义为“荧光”，而从三线态迁移的发光则为“磷光”。荧光是伴随相同旋转多重度之间的电子迁移的发光，可维持的电子旋转状态是极为暂短的。相对而言，磷光是伴随不同旋转多重状态之间的电子迁移的发光，旋转状态会变化，本来是禁止迁移的，该迁移需要较长的时间。也就是说这意味着发光寿命会较长。

有机EL单体中EML有机材料的案例



EML材料分析案例

使用Coumarin 6的结构分析案例

介绍采用SYNAPT G2 HDMS对Coumarin 6的测定案例

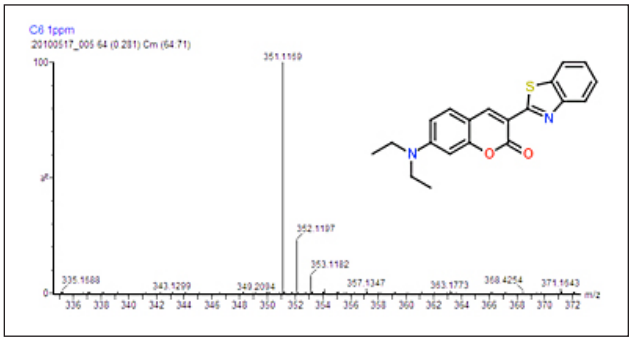


图3. Coumarin 6的MS图谱。

■ MS图谱

单级Tof MS模式下，获取分子量信息。用电喷雾（ESI）进行Coumarin 6的离子化，通过增加质子带电的[M+H]+进行检测。用Tof MS，来获得mDa单位的精确质量和稳定的同位素模型信息（图3）。

■ 基于精确质量测定的组成分析

从MS图谱进行组成分析后，图4显示了分析结果的画面。图4中的绿框表示精确质量精度(实测值与计算值的差)。i-Fit通过精确质量精度和稳定同位素模型的一致性对组成候选范围进行缩小，是分析未知化合物组成的有效功能(图4红框)。

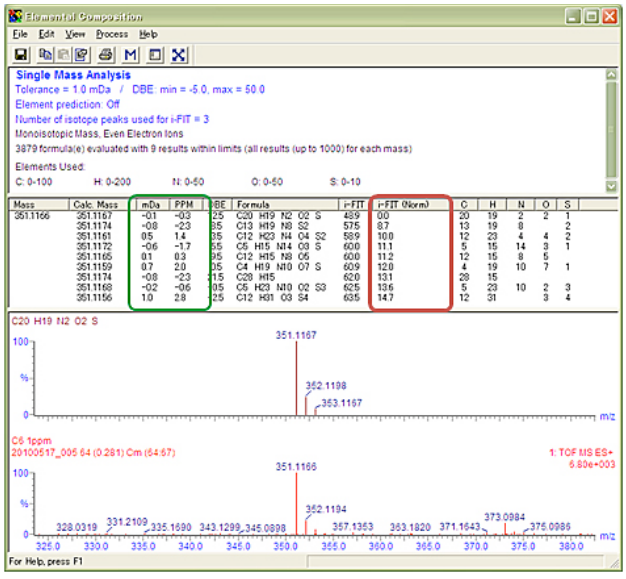


图4. 质谱图的组成分析结果。

■ 双碰撞室的MS/MS测定

用MS/MS测定获取碎片结构信息时，对刚性结构的化合物，需要提高碰撞诱导分解（CID）中的能量。能量提高后，可以获得更小碎片的结构信息。但是提高能量本身在促进碎片生成的同时也增加了离子数量的损失，因此在感度与碎片精确质量精度的层面上并没有很好的方法。在SYNAPT G2 HDMS中，通过双碰撞室，可以进行二次碎片碰撞，从而有效地获得更详细的信息（图5）。

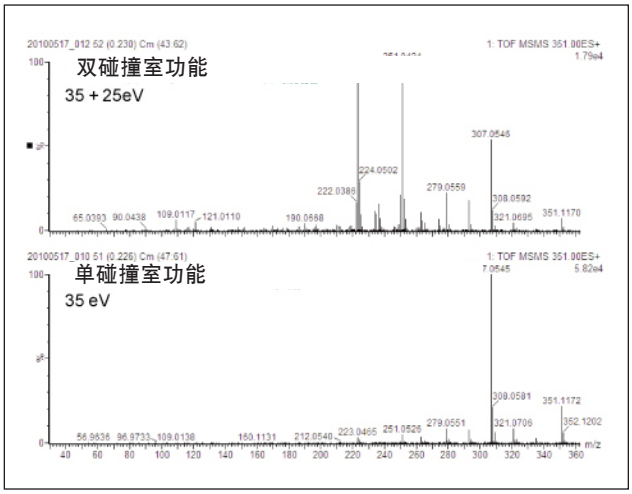


图5. Coumarin 6的MS/MS图谱。

EML有机材料分离分析的系统解决方案

UPLC/FLR（荧光检测器）

■ 高感度荧光检测器
■ 荧光检测的扫描功能
■ 最佳的类似体、异构体分离的超高分离能力
■ 分离条件探讨中最佳移动相Autoblend
■ 各类丰富的色谱柱
■ 最佳的回收率测定的高度再现性
■ 反应监控中最佳的超高速分离

EML有机材料杂质图谱的系统解决方案

UPLC/SYNAPT G2 HDMS（UPLC/四级杆·IMS·飞行时间质谱仪）

■ 刚性结构有效分析的双碰撞室

- 配置有效分离异构体的离子淌度功能
- 复杂分子结构有效预测的TAP碎片（碎片离子间归属）
- IntelliStart的自动校准功能
- 基于LockSpray功能的高精度精确质量测定
- 基于i-Fit功能的高精度组成分析
- 最适合超高速高分度度LC
- 支持ESCi、APCI/APPI、ASAP、APGC、MALDI

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

沃特斯中国有限公司
沃特世科技（上海）有限公司

北京：010 - 5209 3866
上海：021 - 6156 2666
广州：020 - 2829 6555
香港：852 - 2964 1800

免费售后服务热线：800 (400) 820 2676
www.waters.com

©2010沃特世公司
2010年10月

LLOYD'S REGISTER QUALITY ASSURANCE · ISO9001
UKAS QUALITY MANAGEMENT 001
IQNet