

## 【技術資料】高磁場 NMR による高分子材料(ポリプロピレン)の立体規則性解析

### 概要

核磁気共鳴(NMR)装置では、 $^{13}\text{C}$  NMR により高分子材料の分岐・配列・末端・立体規則性等の解析を行うことができます。弊社に導入した 700MHz NMR 装置(溶液プローブ)は、 $-130^{\circ}\text{C}\sim 150^{\circ}\text{C}$ までの幅広い温度範囲に対応しており、ポリエチレンやポリプロピレン等、高温でしか溶解しないポリオレフィンの溶液 NMR 測定が可能です。

高分子材料の立体規則性は、耐熱性や機械的強度等の物性に大きく影響する因子の 1 つです。本技術資料では、700MHz NMR によるポリプロピレンの立体規則性(メソペンタッド分率)の解析事例をご紹介します。

### 分析方法・分析装置

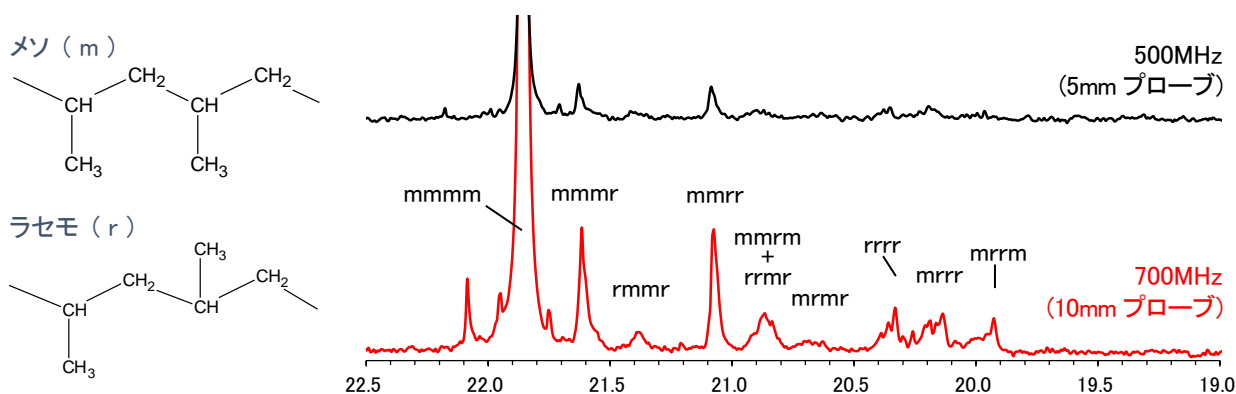
- ・分析方法：1次元  $^{13}\text{C}$ -NMR
- ・分析装置：700MHz NMR (比較:500MHz NMR)

### 試料

ポリプロピレン(PP)

### 結果

ポリプロピレンの  $^{13}\text{C}$  NMR スペクトル【図 1】とメソペンタッド分率(mmmm)の算出結果【表 1】を示します。700MHz NMR(10mm プローブ)ではピークがより明瞭に観測され、既設の 500MHz NMR 装置(5mm プローブ)に比べ、より微量な成分の検出と高確度なメソペンタッド分率の評価が可能となりました。



【図 1】ポリプロピレンの  $^{13}\text{C}$  NMR スペクトル

(700MHz・500MHz 同条件で測定、同 S/N 比、測定温度:  $130^{\circ}\text{C}$ 、逆ゲートッドデカップリング)

【表 1】立体規則性の評価

試料	メソペンタッド分率 [%]
ポリプロピレン	80.9

## まとめ

700MHz NMR を用いることで、高確度にポリプロピレンの立体規則性(メソペンタッド分率)を評価することが可能です。立体規則性は結晶性や分子運動性と密接に関係し、高分子材料の物性に影響を与えます。立体規則性の解析結果は、物性との相関解析や、製品の品質検査等に役立てることができます。

## 参照文献

- 1) Vincenzo Busico et al., *Macromolecules* **27**, 4521–4524 (1994).
- 2) 日本分析化学会 高分子分析研究懇談会編 『新版 高分子分析ハンドブック』 紀伊國屋書店 (1995).

適用分野：NMR、分子構造解析、高分子材料

キーワード：ポリプロピレン、ポリオレフィン、PP、立体規則性、メソペンタッド分率、700MHz NMR