

材料選定に向けた固体 ^{13}C NMR の活用方法

セルロースファイバー（CNF）の事例

市場から入手できる CNF は数十種類におよびます。固体 ^{13}C NMR を用いた手法により粉体やフィルムのまま結晶状態、官能基の種類や導入量の詳細を明らかにできます。分子レベルでのアプローチが可能です。

●固体 ^{13}C NMR による解析

市販される一般的な化学解繊タイプの CNF のスペクトルです（図 1）。化学解繊タイプの CNF には 174 ppm にカルボニル基のピークが観測され、積分比からおおよそ 18% の導入量であることがわかります。また、C4 位のデコンボリューションにより結晶状態を詳細に分析することが可能です（図 2）。機械解繊タイプの CNF も同様の解析することで得られた結果を表 1 に示します。結晶部、非晶部をはじめ詳細な結晶に関する情報が得られます。CNF の特徴を詳細に理解することで分散性や反応性を想定した適切な材料選定につながります。

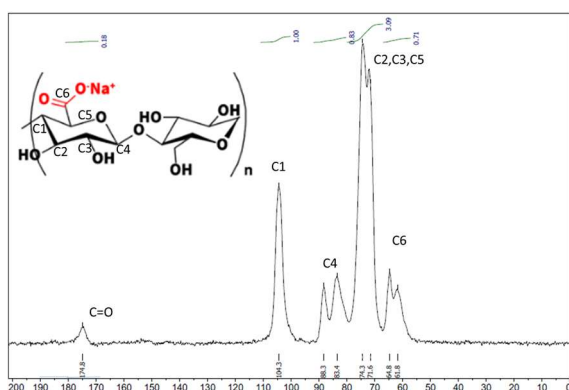


図 1 化学解繊 CNF の固体 ^{13}C NMR スペクトル

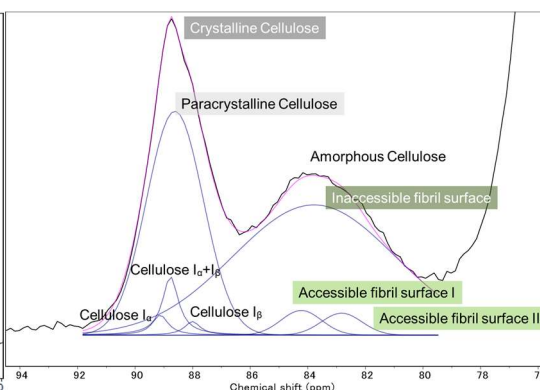


図 2 化学解繊 CNF の C4 位のピークデコンボリューション

表 1 各種 CNF の結晶多形ならびにカルボキシル基導入量

サンプル	結晶多形				カルボキシル基導入量 (%) [(-COOH)]/[C1]
	結晶部 (%)	非晶部 (%)	I α 型結晶 (%)	I β 型結晶 (%)	
機械解繊	38.8	61.2	14.2	24.6	0
化学解繊	28.2	71.8	10.9	17.3	18