

¹³C-NMRによるPP(ポリプロピレン)の立体規則性評価

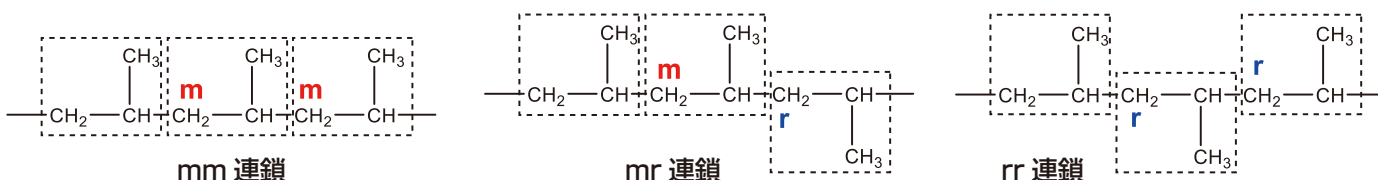
立体規則性はポリマーの分子間相互作用や結晶化の程度の支配因子の一つであり、ポリマーの融点、溶解性、弾性、透明性、耐久性などの物性や機能に密接に関係している。ポリマーの立体規則性やその分布の評価は、ポリマーの重合や改良、物性発現の理解に重要である。立体配置の違いによりCH₃領域のケミカルシフトが異なる NMR 法は、立体規則性の評価に有効である。

▶ ¹³C-NMRによる立体規則性評価

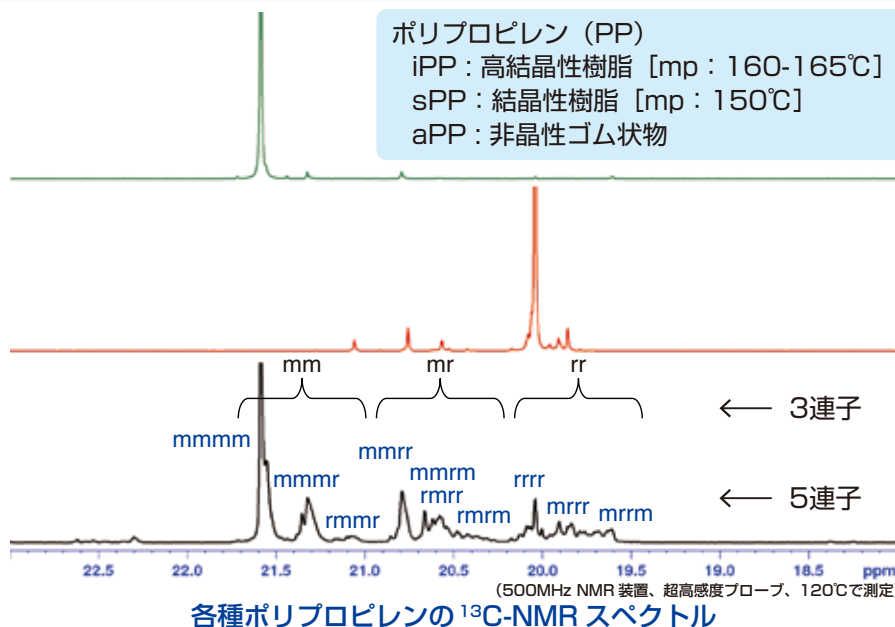
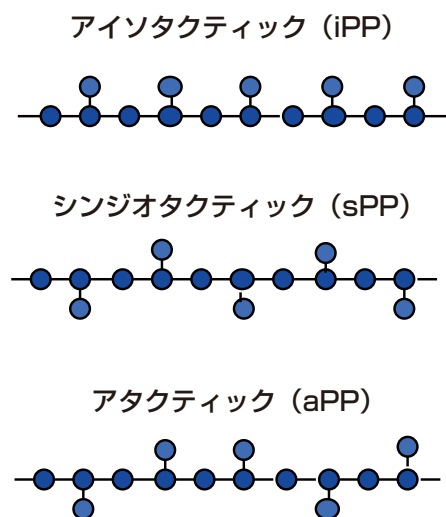
用語の定義

ポリマー主鎖に対して隣り合うモノマー単位の側鎖が同じ向きに並ぶものをメソ (m)、異なる向きに並ぶものをラセモ (r) と呼ぶ。3個以上のモノマー単位からなる連鎖の立体配置もmとrを用いて表示される。一般にPPではプロピレンモノマーが3つ連なった3連子(トライアッド)、5つ連なった5連子(ペンタッド)の立体規則性を評価する。

PPの側鎖メチル基の立体配列様式(例:3連子)



▶ 立体規則性の異なるポリプロピレンの比較例



<アイソタクティシティー算出法>

$$\frac{\text{mmmm 連鎖 または mm 連鎖の CH}_3 \text{ 基の数 (ピーク面積)}}{\text{全 CH}_3 \text{ 基の数 (ピーク面積)}} \times 100$$

	アイソタクティシティー	
	トライアッド (mm%)	ペンタッド (mmmm%)
iPP	94.4	91.9
sPP	2.9	0.2
aPP	48.5	33.2

