

# パルスNMRによる溶液の自己拡散係数評価

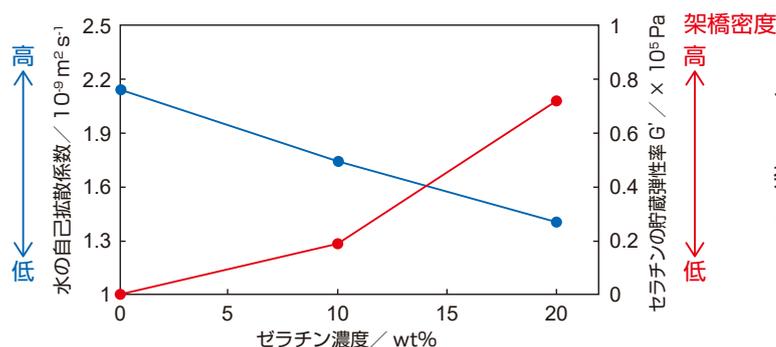
磁場勾配ユニットを搭載したパルス NMR（広幅 NMR）により、溶液の自己拡散係数を測定できる。ここでは、ゼラチンゲル中の水の自己拡散係数よりゲルの網目構造を推定した事例を紹介する。

## ▶ 自己拡散係数が関与する材料物性・構造

- 溶液の自己拡散係数は粘度やイオン電導性、流動性などの材料物性と相関がある。例えば、電解質膜中の水の拡散係数は電池性能に影響することが知られている。
- エマルションや含水ゲルなど、液体を含む材料において液体分子の拡散係数を評価することにより、材料の空間サイズ（液滴 / 細孔 / 網目等）のような構造に関する情報を得ることができる。

## ▶ 自己拡散係数を用いた材料評価の例

ゼラチンゲル中の水の自己拡散係数のゼラチン濃度依存性を測定し（図 1）、濃度に対するゼラチンゲルの網目構造の差異を推定した。



ゼラチン濃度の増加に伴い、水の自己拡散係数は低下し、ゲルの弾性率が增大した。架橋密度が高くなり、ゲルの網目構造が緻密になったことで、水の拡散が制限されたためと考えられる（図2）

図 1. ゼラチンゲル中の水の自己拡散係数 (20 °C) の濃度依存性

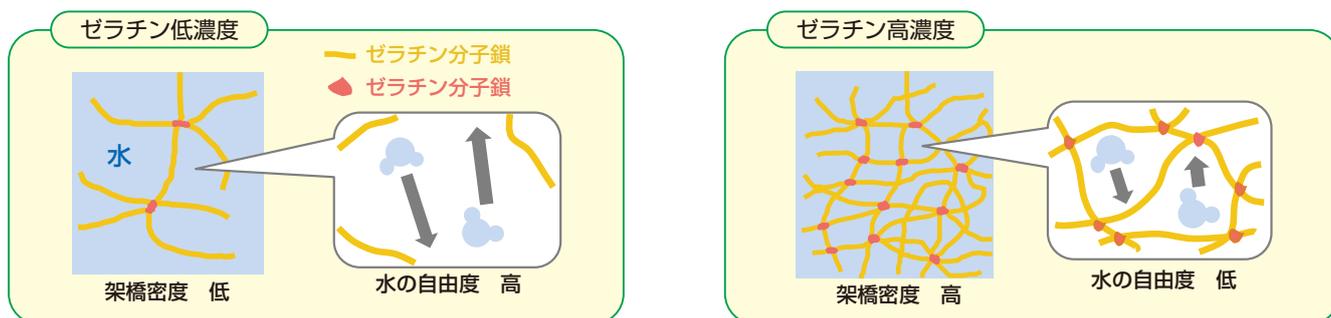


図 2. ゼラチンゲルの網目構造と水分子の拡散（イメージ）

## ▶ 自己拡散係数を用いた材料評価の例

- 液体の分子拡散、輸送現象の評価
- 油中水滴 (W/O)、水中油滴 (O/W) エマルション中の液滴径分布評価 など

## ▶ 装置および測定可能な諸条件

- 磁場勾配ユニット搭載パルス NMR 装置（測定核： $^1\text{H}$ ）
- 温度範囲： $-10 \sim 70 \text{ }^\circ\text{C}$
- 必要サンプル量：0.5 ~ 3 g 程度
- 希釈せずそのままの状態でも評価可能
- 有機物のみならず、無機物含有サンプルも測定可能

