

多孔質材料中に生成されたコクリスタルの低波数ラマン分光測定

Low-frequency Raman spectroscopy of cocrystal incorporated in porous structures

NTT 先端集積デバイス研¹, NTT 物性基礎研², °太田 竜一^{1,2}, 上野 祐子², 味戸 克裕¹

NTT Device Technology Labs.¹, NTT Basic Research Labs², NTT Corporation,

°Ryuichi Ohta, Yuko Ueno, Katsuhiko Ajito E-mail: ota.ryuichi@lab.ntt.co.jp

ラマン分光測定は物質の同定や定量を行う分析手法として確立した技術であり、近年、低波数領域(3.33 ~ 333 cm⁻¹, 0.1 ~ 10 THz)での測定が可能になったため、分子間結合に由来する振動モードを観測できる新しい手法として注目されている。分子間結合は複数の異種分子から構成されるコクリスタルの生成において重要な役割を果たしているため¹、その簡易な測定手法は化学、薬学、医学の発展を支える基礎技術として期待されている。今回、我々は、均一で周期的なナノメートルサイズの空孔を有するポーラスシリカ中に生成されたコクリスタルの低波数ラマン分光測定を行い、スペクトル分離解析を用いて生成過程における組成の変化を追跡した。その結果、ポーラスシリカ中でのコクリスタルは壁面に積層されながら薄膜状に生成されることが示唆された。

コクリスタルはカフェインとシュウ酸より合成した²。コクリスタル溶液をポーラスシリカに一定時間浸し、溶媒を蒸発させることでポーラスシリカ中での再結晶化を行った後、波長 785 nm の励起光を用いた低波数ラマン測定で評価した。図 1 にポーラスシリカ中(実線)と微結晶(破線)でのコクリスタルの低波数ラマンスペクトルを示す。ポーラスシリカ中と微結晶でのスペクトル形状の違いから、コクリスタルはポーラスシリカ壁面に形成され、壁面と相互作用していると考えられる。次に、スペクトル分離解析によってポーラスシリカ中でのコクリスタル生成過程における組成の変化を調べた。図 2 にポーラスシリカ 50 mg 中に含まれるカフェインとシュウ酸の含有量を変化させたときの組成変化を示す。含有量が少ない場合は、カフェインの壁面への吸着が優先的に観測され、含有量の増加とともにコクリスタルの形成に伴うスペクトルが観測された。以上から、コクリスタルがポーラスシリカの壁面に沿って層状に生成されていることが示された。この結果からポーラスシリカを基盤材料とすることで、ナノスケールのコクリスタルが生成可能であると考えられる。

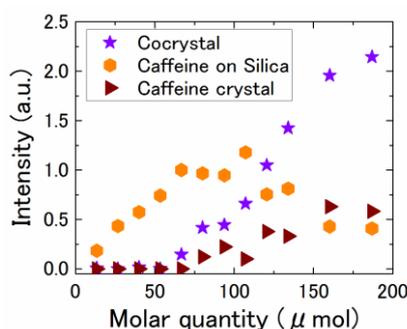
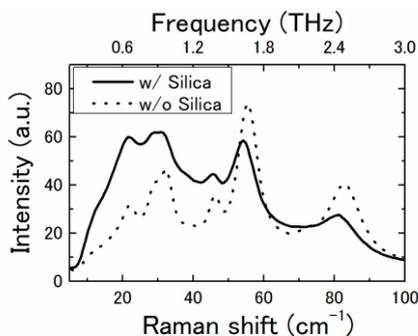


図 1: コクリスタルの低波数ラマンスペクトル 図 2: コクリスタル生成過程における組成変化

[1] K. L. Nguyen *et al.*, *Nat. Mat.* **6**, 206 (2007) [2] D. M. Charron *et al.*, *Anal. Chem.* **85**, 1980 (2013)