

# 標準物質等のスペクトルのデータベースの提供

## 報 告 書

平成 24 年 3 月 31 日

一般社団法人日本海事検定協会

(理化学分析センター)

## 目 次

### 1. 研究の背景

### 2. 研究の目的

### 3. 研究の経過

### 4. 研究内容

<スペクトルデータベース目次>

### 5. 各種スペクトルの解析のための基礎知識と応用例

付録1 炭化水素の IR スペクトルの捉え方

付録2 グリコール化合物の赤外線吸収スペクトル

付録3 油脂の赤外線吸収スペクトル【赤外線吸収スペクトルと分子構造】

付録4 繊維の熱分解ガスクロマトグラフィー

付録5 芳香族化合物の UV スペクトル

## 1. 研究の背景

標準物質等のスペクトルは分析化学においては極めて重要な化学情報であり、特に物質特定や異物鑑定等の調査においては必要不可欠である。しかし、私たちの周囲に存在する物質の種類は極めて多く、それらを対象としたスペクトルを入手することは容易ではない。

一方、公開されたスペクトルデータベースは、質的あるいは収集数が決して充分とは言えず、研究者はそれぞれのスペクトルを有償で、あるいは標準物質を購入して測定しなくてはならないのが実情である。それは時間的にも経済的にも大きな負担となっていることは明らかであり、また、多くの公開情報が純物質に限ったスペクトルが多く、サンプルを処理して純物質を単離してからでないとは活用することが出来ない。スペクトル等の公開については、現状、研究文献の中に散見されるものの、体系的に整理され、共通に利用できるデータベースは整備されていない。

そこで、純物質に限らず複合物質を含めて私たちの身の回りにある物質のスペクトル等を公開し、広く化学情報を提供することで分析化学の発展に資するものとした。

本スペクトルデータベースには以下の内容を掲載した。

分析方法（測定機器）	2011 年度
1. 赤外線吸収スペクトル分析	394
2. 熱重量-示差熱分析	91
3. 紫外線吸収スペクトル分析	34
4. ガスクロマトグラフ分析	36
5. X線回折	9
小計（延べ）	564 物質

さらに、類似物質のスペクトルの違いやスペクトルの見方などについて「付録」として詳細な解析を行った。2011年度の付録では5テーマについて公開する。

## 2. 研究の目的

スペクトルの活用については、必ずしも物質を特定するためのニーズばかりではなく、簡易的に特定物質の存在をチェックするような使い方も少なくない。そうしたニーズに応えるには、より多くのスペクトル情報が公開されることが望ましい。

さらに広範な利用形態に対応した機能を実現するため、化学物質のデータベースの仕様作成及び運用に関する研究を進め、学校法人、高校・大学の学生、あるいは分析化学に携わっている方々の活用を願うものである。

## 3. 研究の経過

2011年度 化学情報 DB の構成設計、収集データ種目の決定とデータ収集

2012年度 収集データ種目の検討と化学情報 DB のデータ収集

2013年度 化学情報 DB のデータ収集および DB 高度化に向けて基本設計

2014年度 化学情報 DB のデータ収集および DB 高度化に向けて開発実施

#### 4. 研究内容

本研究では、各種スペクトル及び様々なスペクトルの解析報告書（付録）を公開する。各種分析機器による測定結果（スペクトル）の分類目次及び測定数（検体数）を以下に示す。延べ 572 検体のサンプルについてスペクトルを得た。

赤外線吸収スペクトル分析		熱重量-示差熱分析	
分類	検体数	分類	検体数
1. 炭化水素	84	1. 化学薬品（有機物）	9
2. アルコール	34	2. 化学薬品（無機物）	7
3. エーテル	15	3. 石油関係	13
4. ケトン, アルデヒド	29	4. 石炭関係	8
5. 酸	16	5. タンパク質	4
6. エステル	26	6. 高分子（プラスチック, ゴム, 繊維）	16
7. フェノール類	5	7. 固形燃料	7
8. アミン	14	8. 炭水化物・その他	27
9. ポリマー	100	合計	91
10. 無機物	26	ガスクロマトグラフ分析	
11. 界面活性剤	8	分類	検体数
12. グリース	2	1. 石油製品	21
13. 色素	6	2. 木材	9
14. 食用油	29	3. いちご	6
15. その他	18	合計	36
合計	394	X線回折	
赤外線吸収スペクトル分析		分類	検体数
分類	検体数	1. 日用品	9
1. 日用品・食品等	22	合計	9
2. 化学物質	12	—	
合計	34		

※ 次頁の分析名をクリックすると、スペクトルが参照できます。

## スペクトルデータベース目次

[赤外線吸収スペクトル分析 \(FT-IR\)](#)

[熱重量-示差熱分析 \(TG-DTA\)](#)

[紫外線吸収スペクトル分析 \(UV-VIS\)](#)

[ガスクロマトグラフ分析 \(GC\)](#)

[X線回折分析 \(XRD\)](#)

## 炭化水素

1. 軽油
2. A 重油
3. C 重油 (グレード 380)
4. ジェット燃料
5. Light Cycle Gas Oil (LCGO)
6. ハイオクガソリン
7. レギュラー+ハイオクガソリン
8. 潤滑油
9. アスファルト
10. アントラセン
11. 1-ウンデセン
12. 1-エイコサン
13. 4-エチル-m-キシレン
14. 3-エチルトルエン
15. エチルベンゼン
16. 1-オクタデセン
17. オクタン
18. ガソリン(レギュラー)
19. m -キシレン
20. o-キシレン
21. p -キシレン
22. クロロホルム
23. 原油
24. 1,2-ジエチルベンゼン
25. 1,3-ジエチルベンゼン
26. p-ジエチルベンゼン
27. ジエチルベンゼン
28. ジクロロベンタジエン
29. ジベンジル
30. 2,6-ジメチル-4-ヘプタノン
31. p-シメン
32. 重油
33. 潤滑油 (ベースオイル)
34. スチレン
35. デカン
36. 1-デセン
37. 1-テトラデセン
38. 1,2,3,4-テトラメチルベンゼン
39. 1,2,3,5-テトラメチルベンゼン
40. 1,2,4,5-テトラメチルベンゼン
41. 灯油
42. 1-ドコセン
43. ドデカン
44. n-ドデシルベンゼン
45. 1-ドデセン
46. 1,3,5-トリエチルベンゼン
47. 1-トリデセン
48. 2,4,4-トリメチル-1-ペンテン
49. 2,4,4-トリメチル-2-ペンテン
50. 1,2,4-トリメチルベンゼン
51. トルエン
52. ナフサ
53. ナフタレン
54. ノナン
55. 1-ノネン
56. パラフィンワックス
57. バンカーC 重油 (グレード 180)
58. ビフェニル
59. フェナントレン
60. iso-プチルベンゼン
61. n-プチルベンゼン
62. 2-n-プロピルトルエン
63. 3-n-プロピルトルエン
64. 4-n-プロピルトルエン
65. iso-プロピルベンゼン (クメン)
66. n-プロピルベンゼン

67. 1-ヘキサデセン
68. ヘキサン
69. 1-ヘキセン
70. 1-ヘプタデセン
71. ヘプタン
72. ヘメリテン
73. ベンゼン
74. 1,3-ペンタジエン
75. 1-ペンタデセン
76. ペンタメチルベンゼン
77. 1-ペンテン
78. 2-ペンテン
79. ポリスチレン
80. メシチレン
81. 2-メチル-1-ブテン
82. 2-メチル-1-ペンテン
83. メチルシクロペンタジエン ダイマ-
84. リモネン

## アルコール類

1. tert-アミルエチルエーテル
2. アリルアルコール
3. 1-エイコサノール
4. エタノール
5. オクタノール
6. オレイルアルコール
7. カテコール
8. グリセリン
9. ジエチレングリコール
10. シクロヘキサノール
11. 1-デカノール
12. 1-テトラデカノール
13. ドデカノール
14. トリエチレングリコール
15. 1-トリデカノール
16. トリメチレングリコール
17. 2-フェニルエタノール
18. 2-ブタノール
19. フルフリルアルコール
20. 1-プロパノール
21. プロピレングリコール
22. 1-ヘキサデカノール
23. 1-ヘキサノール
24. ヘプタデカノール
25. ヘプタノール
26. ベンジルアルコール
27. 2-ペンタノール
28. ポリエチレングリコール
29. マンニトール(糖アルコール)
30. メタノール
31. 3-メチル-1-ブタノール
32. 3-メチル-2-ブテン-1 オール
33. 2-メチル-2-プロパノール
34. 1-メトキシ-2-プロパノール

## エーテル

1. tert-アミルメチルエーテル
2. イソプロピルセロソルブ
3. エチルn-プロピルエーテル
4. 2-エトキシエタノール(エチルセロソルブ)
5. グラニュー糖
6. ジエチルエーテル
7. 1,3-ジオキサン
8. 1,4-ジオキサン
9. ジフェニルエーテル
10. ジプロピレングリコールモノメチルエーテル

11. ジメキシメタン(メチラール)
12. プチルエーテル
13. プチルセロソルブ
14. メチル tert-プチルエーテル(MTBE)
15. メチルセロソルブアセテート

## ケトン, アルデヒド

1. アセチルアセトン
2. アセトアルデヒド
3. アセトフェノン
4. アセトン
5. イソプチルアルデヒド
6. イソホロン
7. 2-オクタノン
8. p-キシロキノン
9. クロトンアルデヒド
10. ジアセチル(ブタン-2,3-ジオン)
11. ヒドロキシアセトン
12. ビナコリン
13. プチルアルデヒド
14. γ-ブチロラクトン
15. 2-フリルメチルケトン
16. プロピオフェノン
17. 1-ヘキサナール
18. 2-ヘキサノン
19. 3-ヘキサノン
20. 3-ヘプタノン
21. ヘプチルアルデヒド
22. ホルムアルデヒド
23. ホロン
24. 3-メチル-3-ブテン-2-オン
25. 4-メチル-3-ペンテン-2-オン
26. メチルイソプチルケトン
27. メチルイソプロピルケトン
28. メチルエチルケトン(MEK)
29. メチルビニルケトン

## 有機酸

1. アジピン酸
2. L-アスコルビン酸
3. オレイン酸
4. カプロン酸
5. 吉草酸
6. ぎ酸
7. くえん酸
8. くえん酸一水和物
9. 酢酸
10. ステアリン酸
11. 乳酸
12. ノナデシル酸
13. パルミチン酸
14. プロピオン酸
15. ヘプタン酸
16. ラウリン酸

## エステル

1. L(+)-アスパラギン酸ナトリウム一水和物
2. L-グルタミン酸ナトリウム
3. Peanut oil
4. Soybean oil(大豆油)
5. オクタ酸エチル
6. オルトギ酸トリエチル
7. オレイン酸メチル
8. 酢酸 n-プロピル
9. 酢酸エチル
10. ステアリン酸メチル

11. ナタネ油+大豆油
12. パルミチン酸メチル
13. ひまし油
14. フタル酸ジエチルヘキシル
15. プロピオン酸 n-ブチル
16. プロピオン酸イソブチル
17. ポリアクリル酸 2-エチルヘキシル
18. ポリアクリル酸 n-ブチル
19. ポリアクリル酸イソブチル
20. ポリアクリル酸エチル
21. ポリアクリル酸メチル
22. ミリスチン酸メチル
23. こはく酸二ナトリウム
24. 酢酸カルシウム一水和物
25. 酒石酸カルシウム四水和物
26. ステアリン酸カルシウム

#### フェノール類

1. 2,6-dimethoxyphenol
2. 2,4-dimethylphenol
3. 2,6-di-t-butylphenol
4. 3,3,5,5-tetra-t-butyl-4,4-diphenoquinone
5. フェノール

#### アミン類

1. アクリルアミド
2. アクリル酸 2-(ジメチルアミノ)エチル
3. アセトアミド
4. エチレンジアミン
5. ジエタノールアミン
6. ステアリン酸ヒドラジド
7. トリエタノールアミン
8. トリオクチルメチルアンモニウムクロライド
9. 尿素(炭酸ジアミド)
10. 1,3-ビス(アミノメチル)シクロヘキサン
11. ブチルアミン
12. プロピルアミン
13. ベンズアミド
14. モノエタノールアミン

#### ポリマー

1. Acrylonitrile butadiene styrene resin
2. アルギン酸ナトリウム
3. Butylmetacrylate isobutylmethacrylate polymer
4. アセチルセルロース
5. Cellulose acetate butyrate
6. Cellulose propionate
7. Cellulose triacetate
8. Ethyl cellulose
9. Ethylene acrylic acid copolymer
10. Ethylene ethyl acrylic copolymer.sp
11. Ethylene methacrylic acid copolymer
12. Ethylene propylene copolymer
13. Ethylene vinyl acetate copolymer 14w%
14. Ethylene vinyl acetate copolymer 18w%
15. Ethylene vinyl acetate copolymer 25w%
16. Ethylene vinyl acetate copolymer 28w%
17. Ethylene vinyl acetate copolymer 33w%
18. Ethylene vinyl acetate copolymer 40w%
19. Ethylene vinyl alcohol copolymer
20. ヒドロキシエチルセルロース
21. Hydroxypropyl cellulose
22. Hydroxypropyl methyl cellulose
23. Methyl cellulose
24. Methyl vinyl ether maleic acid copolymer
25. Methyl vinyl ether maleic anhydride copolymer
26. N-vinylpyrrolidone vinyl acetate copolymer
27. Nylon11
28. Nylon12

29. Nylon6
30. Nylon6(3)t
31. Nylon6/12
32. Nylon6/6
33. Nylon6/9
34. Phenoxy resin
35. Poly(1-butene),isotactic
36. Poly(2,4,6-tribromostyrene)
37. Poly(2,6-dimethyl-p-phenylene oxide)
38. Poly(2-hydroxyethyl methacrylate)
39. Poly(4,4-dipropoxy-2,2-diphenyl propane fumarate)
40. Poly(4-methyl 1-pentene)
41. Poly(acrylic acid)
42. Poly(butylene terephthalate)
43. Poly(diallyl phthalate)
44. Poly(ethyl methacrylate)
45. Poly(ethylene oxide)
46. Poly(ethylene terephthalate)
47. Poly(isobutyl methacrylate)
48. Poly(methyl methacrylate)
49. Poly(n-butyl methacrylate)
50. Poly(phenylene sulfide)
51. Poly(p-phenylene ether\_ sulphone)
52. ポリテトラフルオロエチレン
53. Poly(vinil stearate)
54. ポリ酢酸ビニル
55. Poly(vinyl alcohol), 98%hydrolyzed
56. Poly(vinyl alcohol), 99.7%hydrolyzed
57. Poly(vinyl butyral)
58. ポリ塩化ビニル
59. Poly(vinyl chloride),carboxylated
60. Poly(vinyl formal)
61. Poly(vinylidene fluoride)
62. Polyacetal
63. Polyacrylamide
64. Polyacrylamide,carboxyl modified high carboxyl content
65. Polyacrylamide, carboxyl modified low
66. Polyamide resin
67. 1,2-polybutadiene
68. Polycaprolactone
69. Polycarbonate
70. Polychloropren
71. Polyethylene, chlorinated 25wt%
72. Polyethylene, chlorinated 36wt%
73. Polyethylene, chlorinated 42wt%
74. Polyethylene, chlorosulfonated 43wt%
75. Polyethylene, highdensity
76. Polyethylene, low density
77. Polyethylene, oxidized
78. Polyisoprene, chlorinated
79. Polypropylene, isotactic
80. Polystyrene
81. Polysulfone
82. Polyvinylpyrrolidone
83. Sodium polyacrylate
84. Styrene acrylonitrile copolymer, 25% acrylonitrile
85. Styrene acrylonitrile copolymer, 32% acrylonitrile
86. Styrene allyl alcohol copolymer, 5,4-6.0% hydroxyl
87. Styrene butadiene, aba block copolymer
88. Styrene butyl methacrylate copolymer
89. Styrene ethylene-butylene, aba block copolymer
90. Styrene isoprene, aba block copolymer
91. Styrene maleic anhydride, partial methyl ester
92. Vinyl chloride vinyl acetate copolymer(vinilchloride 88%, vinyl acetate 12%)
93. Vinyl chloride vinyl acetate

- copolymer(vinilchloride 90%, vinyl acetate 10%)
94. Vinyl chloride vinyl acetate hydroxylpropyl acrylate vinyl chloride 80%,vinil acetate 5%
95. Vinyl chloride vinyl acetate maleic acid terpolymer vinyl chloride 86%,vinil acetate 13%
96. Vinyl chloride vinyl acetate maleic acid terpolymer vinyl chloride81%, vinyl acetate16.5%
97. Vinyl chloride vinyl acetate vinyl alcohol terpolymer
98. Vinylidene chloride 5% vinyl chloride copolymer
99. Vinylidene chloride acrylonitrile 20% copolymer
100. Zein,purified

#### 無機物

1. 塩化アンモニウム
2. 塩化カルシウム
3. 過塩素酸マグネシウム
4. ガラス
5. ガラスファイバー
6. クロロ酢酸
7. ケイ酸マグネシウム(フロリジル)
8. 酸化亜鉛
9. 酸化アルミニウム
10. 酸化ケイ素
11. 酸化マグネシウム
12. 酒石酸カリウム
13. 酒石酸水素カリウム
14. 硝酸マグネシウム・六水和物
15. シリカゲル
16. 水酸化ナトリウム
17. 石英ウール
18. 炭酸カルシウム
19. 炭酸水素ナトリウム
20. 炭酸ナトリウム
21. 土砂
22. 二硫化炭素
23. 硫酸亜鉛・七水和物
24. 硫酸カルシウム
25. 硫酸マグネシウム・七水和物
26. リン酸二水素カルシウム

#### 界面活性剤

1. 1-オクタンスルホン酸ナトリウム
2. 石けん
3. ソルビタンモノオレエート(Span80)
4. 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸ナトリウム
5. ノニオン(NA-2)
6. ノニオン(NB-1)
7. ノニオン(NC-1)
8. ノニオン(ND-1)

#### グリース

1. グリース(Ca, Zn)
2. グリース(Mo, S)

#### 色素

1. チモールブルー
2. チモールブルーナトリウム
3. プロモクレゾールグリーン
4. プロモフェノールブルー
5. メタクレゾールパープル
6. メチレンブルー三水和物

#### 食用油

1. RBD ココナッツ油
2. RBD パームカーネルオイル

3. アーモンド油
4. アボカド油
5. 亜麻仁油
6. エキストラバージンセサミオイル
7. エゴマ油(シソ油)
8. オリーブ油
9. グレープシード油
10. コーン油
11. ゴマ油
12. コメ油
13. サフラワー(ペニバナ)油
14. サラダ油(ナタネ, キャノーラ)
15. 白ゴマ油
16. 大豆油
17. トリリノレイン
18. パーム原油

19. パーム油
20. 廃食用油
21. バター(有塩)
22. 発酵バター(無塩)
23. ヒマワリ油
24. ヘット(牛脂)
25. ホホバ(ジョジョバ)シード油
26. マーガリン
27. マカダミアナッツ油
28. 綿実油(めんじつゆ)
29. ラード(豚脂)

#### その他

1. ウコンドリンクA
2. ウコンドリンクA(100°C乾燥後)
3. ウコンドリンクB

4. ウコンドリンクB(100°C乾燥後)
5. 乾燥わかめ
6. クエン酸ナトリウム
7. 血液
8. Di-tert-butyl peroxide
9. ジメチルスルホキシド
10. 酒石酸水素ナトリウム一水和物
11. シリコーンオイル
12. ステアリン酸ナトリウム
13. デオキシコール酸
14. ビタミン A パルミテート,油性
15. 2-ピロリドン
16. ヨードチンキ
17. ラウリン酸ナトリウム
18. リン酸水素カリウム



## 熱重量-示差熱分析

### 化学薬品（有機物）

1. EG(エチレングリコール)
2. アルカリ石けん
3. グリセリン
4. 樟脳(カンファー)
5. 石けん
6. ソルビトール
7. 中性洗剤
8. フェノール
9. 油脂(ナタネ油)

### 化学薬品（無機物）

1. 硫黄
2. 塩化ナトリウム
3. シリカゲル(吸湿前)
4. シリカゲル(吸湿後)
5. 炭酸カルシウム
6. 炭酸水素ナトリウム
7. 炭酸ナトリウム

### 石油系

1. A重油
2. C重油
3. LSA重油
4. アスファルテン
5. アスファルト
6. 軽油
7. 減圧軽油
8. 潤滑油(使用油)
9. 潤滑油(新油)
10. 灯油
11. パーム原油
12. ワックス
13. マイクロクリスタリーワックス

### 石炭系

1. 鉛筆の芯
2. カーボンブラック
3. 黒鉛(グラファイト)
4. 残炭カーボン(内部)
5. 石炭
6. 石油コークス
7. 備長炭
8. 無煙炭

### 炭水化物、その他

1. 印刷紙
2. ウコン
3. グラニュー糖
4. 小麦粉(デンプン)
5. コルク栓
6. 雑草
7. 砂糖(白糖)
8. ジャスミン
9. 食パン
10. タバコ(フィルター)
11. タバコフィルター(活性炭側)
12. タバコフィルター(活性炭なし)
13. ダンボール
14. 茶
15. 茶(鉄観音)
16. ツバキ(枝)
17. ツバキ(葉)
18. ニトロセルロース
19. 尿素
20. ポテトチップ
21. 木材(鉛筆削りくず)
22. 葉包紙
23. ろ紙
24. ワサビ
25. インスタントコーヒー

26. インスタントコーヒー(顆粒)
27. 貝殻

### たんぱく質

1. きな粉
2. 粉ミルク
3. ゴマ
4. 豆腐

### プラスチック・ゴム・繊維など

1. アクリル
2. アクリロニトリルブタジエンスチレン共重合体
3. 麻
4. 絹
5. 黒ゴム(実験器具用ゴム栓)
6. 脂肪酸メチルエステル
7. シリコンゴム
8. セブタム各種
9. 天然ゴム(輪ゴム)
10. ナイロン
11. ポリエチレン(PE)
12. ポリエチレンテレフタレート(PET)
13. ポリスチレン(PS)
14. ポリプロピレン(PP)
15. 木綿
16. ラテックス

### 固形燃料

1. パームペレット(EFB)
2. RDF(ごみ固形化燃料)
3. RPF(廃紙・プラスチック固形化燃料)
4. ナタネペレット
5. バークペレット
6. 木質ペレット(ブラック)
7. ホワイトペレット

## 紫外線吸収スペクトル分析

### 日用品・食品

1. しょう油 0.4vol%(水溶媒)
2. ソース 0.4vol%(水溶媒)
3. グレープフルーツジュース 6vol%(水溶媒)
4. インスタントコーヒー 40ppm(水溶媒)
5. 黒インク(メタノール溶媒)
6. 赤インク(メタノール溶媒)
7. 蛍光ペン 青(メタノール溶媒)
8. 蛍光ペン 青 50vol%(メタノール溶媒)
9. 蛍光ペン 黄(メタノール溶媒)
10. 蛍光ペン 黄 25vol%(メタノール溶媒)
11. 蛍光ペン オレンジ 50vol%(メタノール溶媒)
12. 蛍光ペン 緑 50vol%(メタノール溶媒)
13. 蛍光ペン ピンク 50vol%(メタノール溶媒)
14. パセリ(エーテル抽出物)
15. 黄パプリカ(エーテル抽出物)
16. クレソン(エーテル抽出物)
17. 赤パプリカ(エーテル抽出物)
18. 朱肉インク 3vol%(メタノール溶媒)
19. 朱色インク 12.5vol%(メタノール溶媒)
20. 赤色インク 6vol%(メタノール溶媒)
21. 藍色インク 12.5vol%(メタノール溶媒)
22. 潤滑油添加剤 6vol%(メタノール溶媒)

### 化学物質

1. N,N-ジメチルホルムアミド 100ppm(メタノール溶媒)
2. N,N-ジメチルホルムアミド 1000ppm(メタノール溶媒)
3. メタクリル酸メチル 10ppm(エタノール溶媒)
4. メタクリル酸メチル 100ppm(エタノール溶媒)
5. メタクリル酸メチル 300ppm(エタノール溶媒)
6. フェノール 43ppm(エタノール溶媒)
7. ベンゼン 10ppm(エタノール溶媒)
8. ベンゼン 90ppm(エタノール溶媒)
9. ベンゼン 90ppm(エタノール溶媒)
10. メチルエチルケトン 100ppm(エタノール溶媒)
11. メチルエチルケトン 10ppm(エタノール溶媒)
12. スチレン 2ppm(エタノール溶媒)

## ガスクロマトグラフ分析

[目次へ戻る](#)

### 石油製品

1. ライトナフサ
2. ヘビーナフサ
3. レギュラーガソリン
4. ハイオクガソリン
5. GTL
6. ジェット燃料
7. 灯油
8. 軽油
9. A重油
10. ライトサイクルガスオイル
11. 潤滑油
12. 流動パラフィン
13. ワックス
14. 180cSt C重油
15. 380cSt C重油
16. 380cSt 高硫黄重油
17. 低硫黄重油
18. 低硫黄ワキシー重油
19. アスファルト
20. UZK 原油
21. KF 原油

### 木材

1. トドマツ
2. 黒松
3. ベイマツ
4. ベニマツ
5. カーリーメープル
6. ソフトメープル
7. パーズアイメープル
8. ハードメープル
9. PC メープル

### いちご

1. いちご A
2. いちご B
3. いちご C
4. いちご D
5. いちご E
6. いちご F

## X線回折分析

1. 片栗粉
2. 強力粉
3. ベーキングパウダー
4. 炭酸カルシウム
5. アルミニウムの錆び
6. 鉄さび(赤さび)
7. 鉄さび(赤さびと黒さびの混合物)
8. プリキ錆び
9. トタン錆び

## 5. 各種スペクトルの解析のための基礎知識及び応用例

スペクトルの解析のための基礎知識，あるいはスペクトルの見方について，付録として以下の5つのテーマで資料を作成した。

### (1) 炭化水素の赤外線吸収スペクトルの捉え方

有機物の基本である炭化水素の赤外線吸収スペクトルの見方及び炭化水素で構成された石油製品の赤外線吸収スペクトルの特徴を示す。

### (2) グリコール化合物の赤外線吸収スペクトル

セロソルブ及びジエチレングリコール化合物の赤外線吸収スペクトルの特徴を示す。

### (3) 油脂の赤外線吸収スペクトル（赤外線吸収スペクトルと分子構造）

動植物油の赤外線吸収スペクトルの特徴及び脂肪酸組成との相関を調査する。

### (4) 繊維の熱分解ガスクロマトグラフィー

各種繊維の熱分解ガスクロマトグラムの紹介及び2種類の繊維が混在するときの熱分解ガスクロマトグラムの変化を調査する。

### (5) 芳香族の UV スペクトル

芳香族化合物の UV スペクトルの特徴及びそれらの僅かな違いを示す。

## 炭化水素の IR スペクトルの捉え方

石油製品の赤外線吸収スペクトルは、官能基の多寡によって製品毎に特有の吸収帯が出現する。

石油製品は炭化水素の混合物であり、製品によってパラフィンやオレフィン、アロマ等の成分組成が異なっているため、赤外線吸収スペクトルからどんな成分が多く含まれているかを捉えることが可能である。石油製品の代表的な特徴を以下に示す。

- 通常のパラフィンワックスは直鎖の飽和炭化水素であるため、主要な官能基はメチレン基である。
- 分解ガソリンは不飽和化合物が多いため、オレフィンの特徴が現れる。
- $3000\text{cm}^{-1}$  以上に吸収帯が出現していれば、アロマか不飽和炭化水素を含んだ製品である。
- 低硫黄ワキシー重油のスペクトルはワックスの特徴 ( $720\text{cm}^{-1}$  付近に 2 本の吸収帯) が出現する。
- 切削油等の沸点が比較的低い潤滑油には n-パラフィンが含まれており、赤外線吸収スペクトルに反映される。

本研究では、石油製品の構成成分である炭化水素の僅かな構造の違いや構成割合の違いが赤外線吸収スペクトルにどのように反映されるのかを知るため、単純な炭化水素のスペクトルを解析した。

### ヘキサン (パラフィン)

ヘキサンはメチル基とメチレン基で構成されているのに対し、1-ヘキセンは官能基の種類が多いため複雑である。

### 1-ヘキセン (オレフィン)

ヘキサンに比べて、オレフィン固有の  $3000\text{cm}^{-1}$ 、 $900\text{cm}^{-1}$  が出現している。このオレフィンバンドは多価不飽和脂肪酸の桐油などにも出現する。

### シクロヘキサン (シクロ/環状)

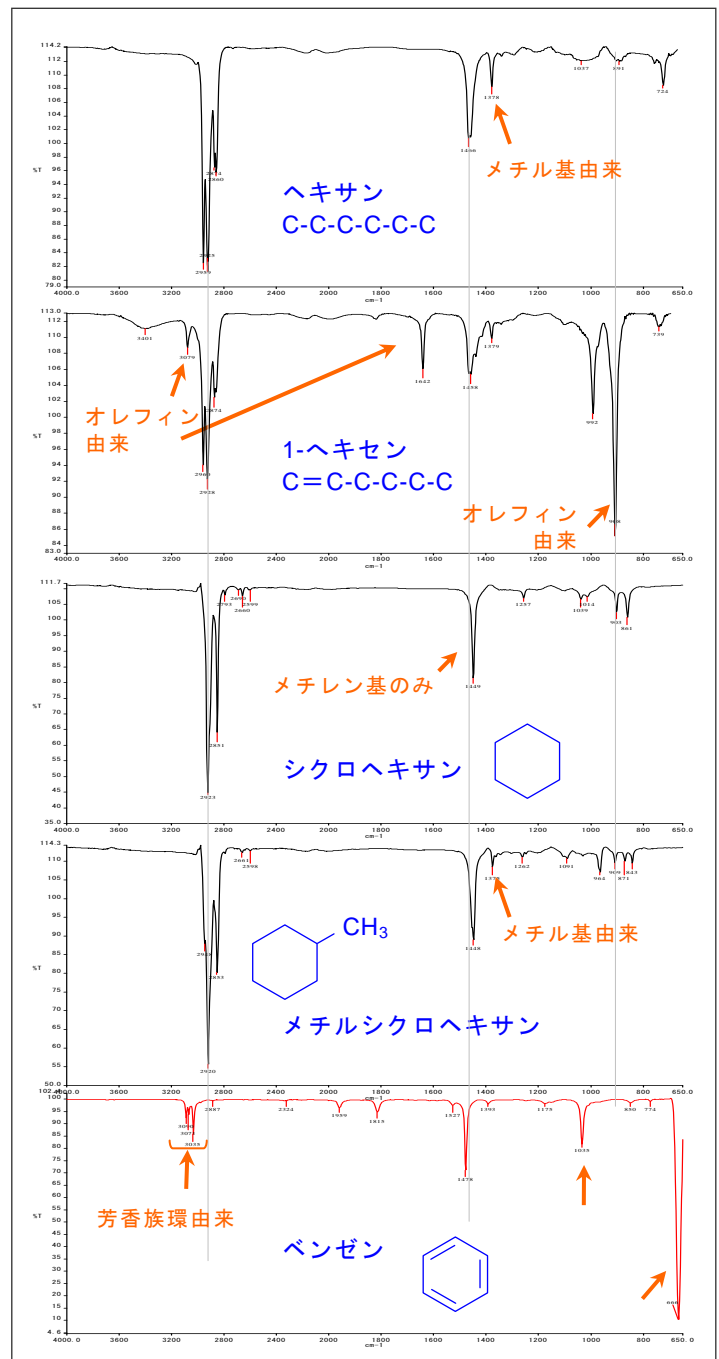
最もシンプルな構造のメチレン基だけで構成されるため、スペクトルもシンプルである。

### メチルシクロヘキサン (シクロ/分岐)

シクロヘキサンと比べるとメチル基がどこに出現するかが良く分かる。

### ベンゼン (芳香族)

メチル基とメチレン基とが消失し、芳香族環に由来した  $3090\sim 3035\text{cm}^{-1}$  に吸収帯が出現している。



## グリコール化合物の赤外線吸収スペクトル

グリコールエーテル等のグリコール誘導体の赤外線吸収スペクトルには以下の特徴が見られる。

- 1110 $\text{cm}^{-1}$  付近にエーテル (-C-O-C-) 由来の大きな吸収帯が2本出現する。ただし、グリコール部の炭素数が増えるにつれ、2本の吸収帯が明確に分かれなくなる。
- 末端の置換基の炭化水素部に分岐があると、スペクトルが大きく変わる。
- グリコール化合物は 1110  $\text{cm}^{-1}$  付近の吸収は共通しているが、同族体であっても赤外線吸収スペクトルのプロファイルの違いが明確であるため、炭素鎖の僅かな違いを識別することが可能と考えられる。

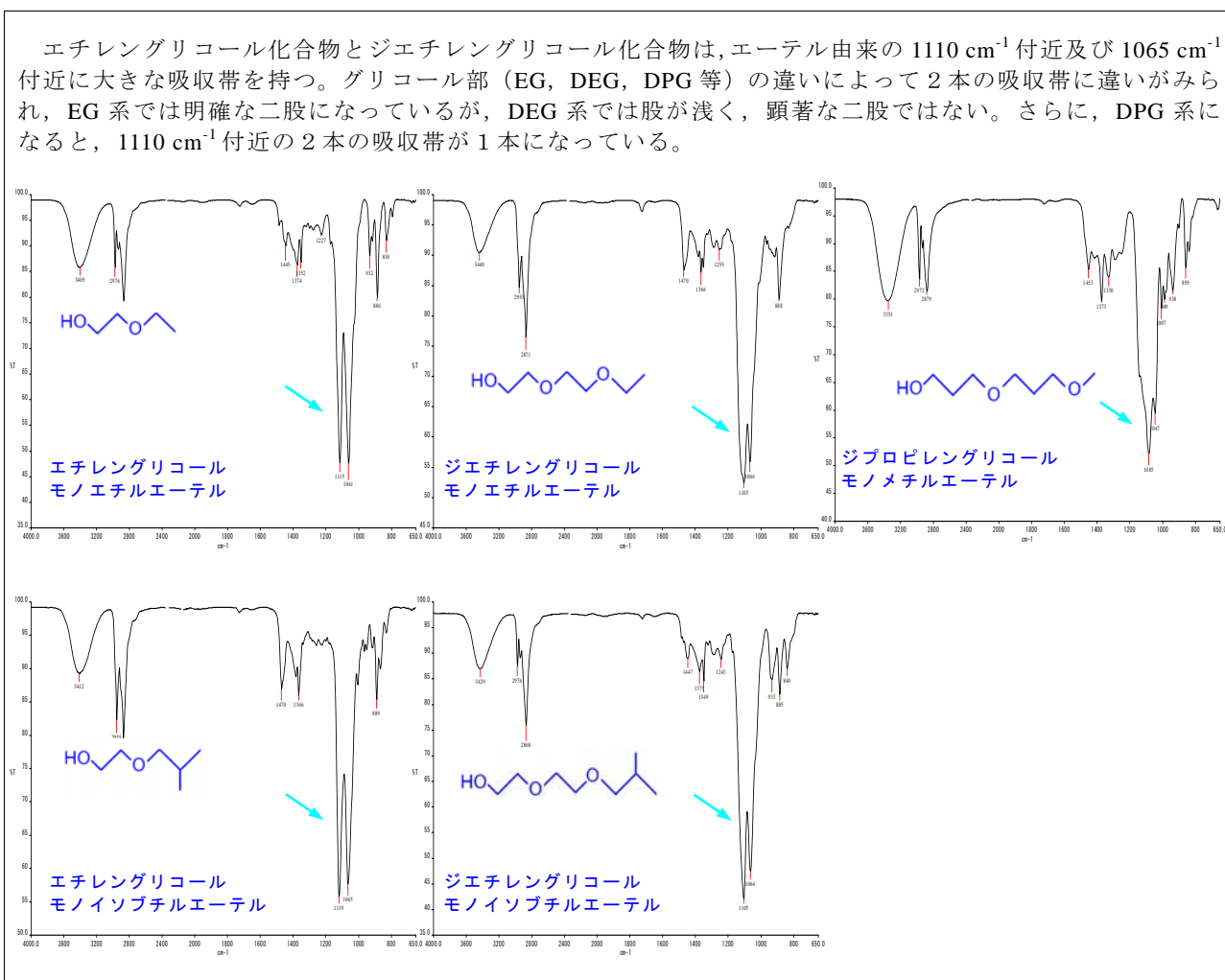
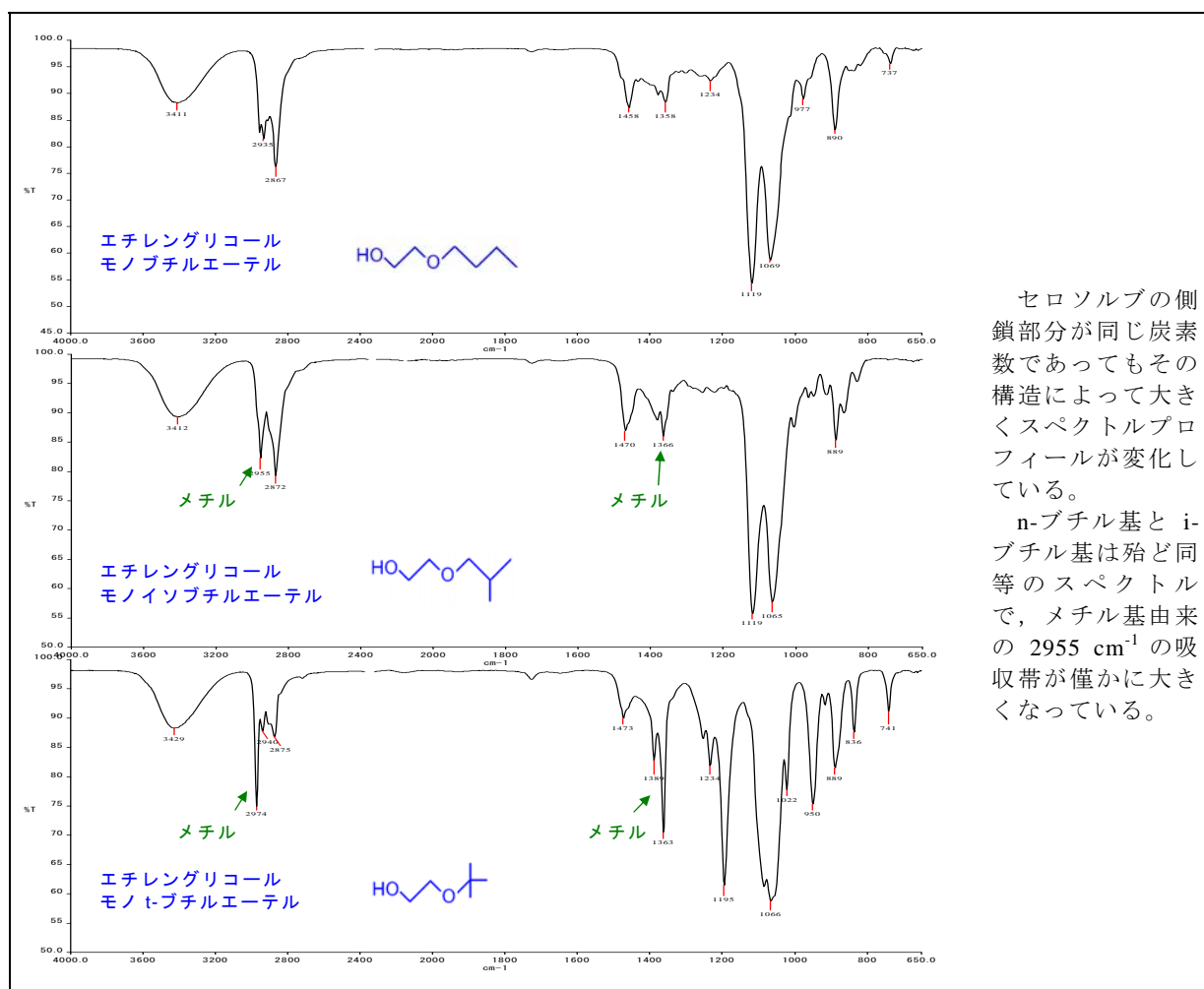


図1 グリコール化合物の特性吸収帯 1110  $\text{cm}^{-1}$  付近



セロソルブの側鎖部分が同じ炭素数であってもその構造によって大きくスペクトルプロファイルが変化している。

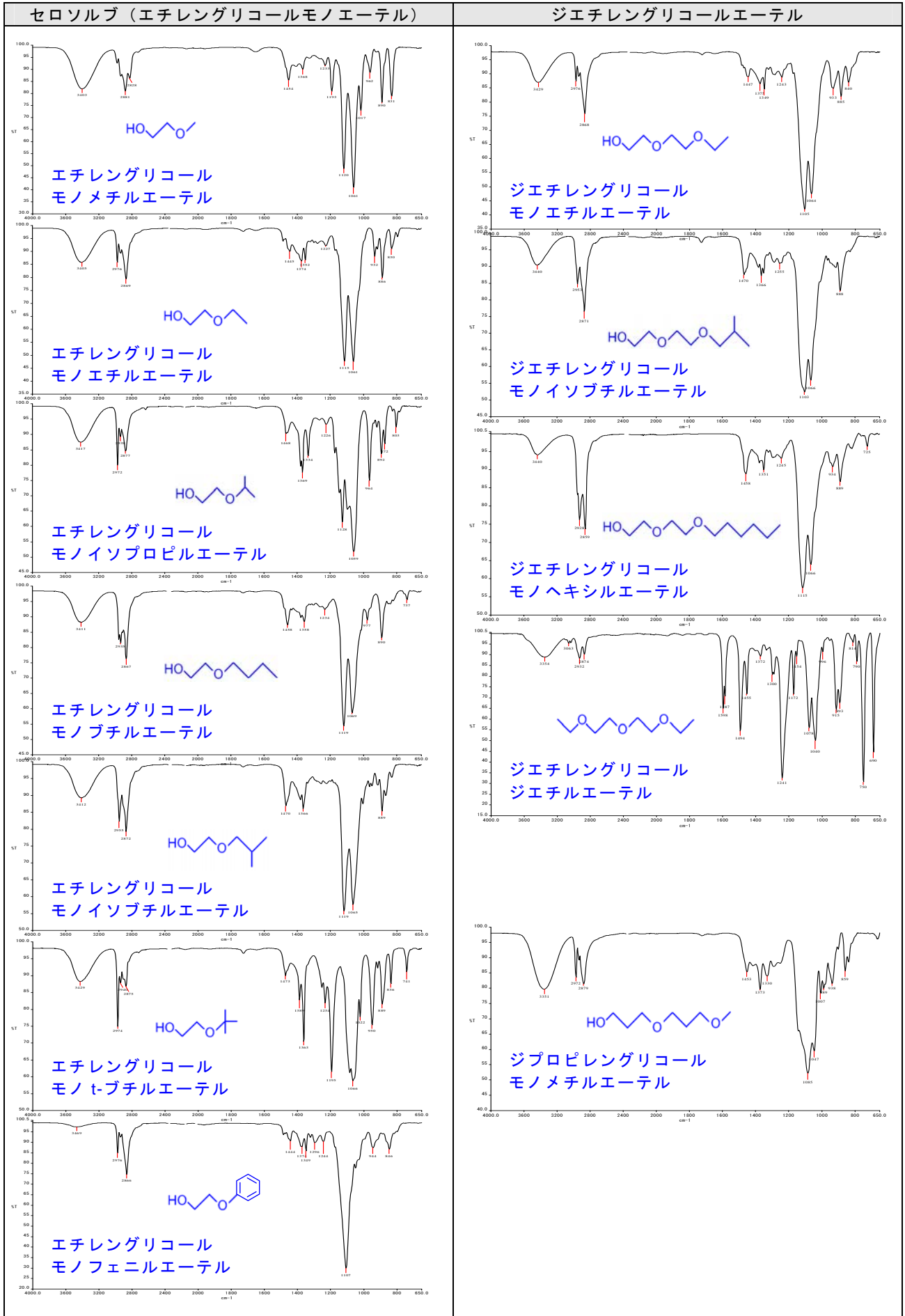
n-ブチル基と i-ブチル基は殆ど同等のスペクトルで、メチル基由来の  $2955\text{ cm}^{-1}$  の吸収帯が僅かに大きくなっている。

図2 側鎖（置換基）の違いによるスペクトルの差異

### 【課題】

- (1) 単純なグリコール化合物だけでなく、モノエーテルアセテート等の関連物質との違いを明らかにする。
- (2) エチレングリコールが環状になった 1,4-ジオキサン（2量体）、3量体、4量体等のスペクトルを得る。

表2 グリコール化合物の赤外線吸収スペクトル



## 油脂の赤外線吸収スペクトル

【赤外線吸収スペクトルと分子構造】

油脂の赤外線吸収スペクトルには、以下の3か所に特徴的な吸収帯が出現する。

- エステル基由来 (-COO-R) …… 1740 cm<sup>-1</sup>
- エーテル基由来 (C-O-C) …… 1150 cm<sup>-1</sup> 付近
- アルキル基由来 (-CCC…) …… 2900 cm<sup>-1</sup> 付近

赤外線吸収スペクトルの解析から得られた事項は以下の通りである。

- 多価不飽和脂肪酸の構造を多く含む亜麻仁油，エゴマ油などはオレフィン由来の 3010cm<sup>-1</sup> の吸収が大きくなる。
- アルキル基由来の 2900cm<sup>-1</sup> とエステル基由来の 1740cm<sup>-1</sup> の吸収比率が試料によって異なっている。これは脂肪酸組成の違いによるものであるが、今年度の研究では脂肪酸組成を測定していないため次年度以降の課題である。
- 脂肪酸のアルキル基の長さ，飽和・不飽和の有無によって 2900 cm<sup>-1</sup> 付近の吸収の大きさ（1740cm<sup>-1</sup> 付近の吸収との比率）に影響が出る。
- 赤外線吸収スペクトルから油脂の種類を特定することは困難であるが，脂肪酸構造中に不飽和を多く持つものは識別ができる。

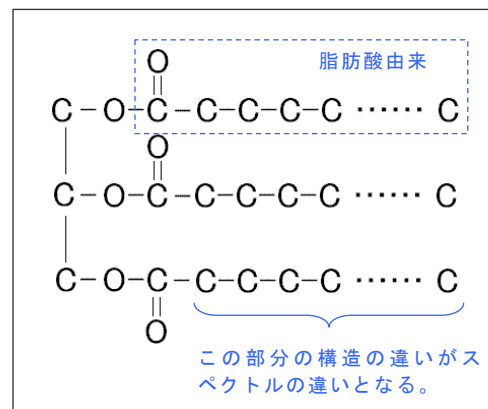


図1 油脂の分子構造

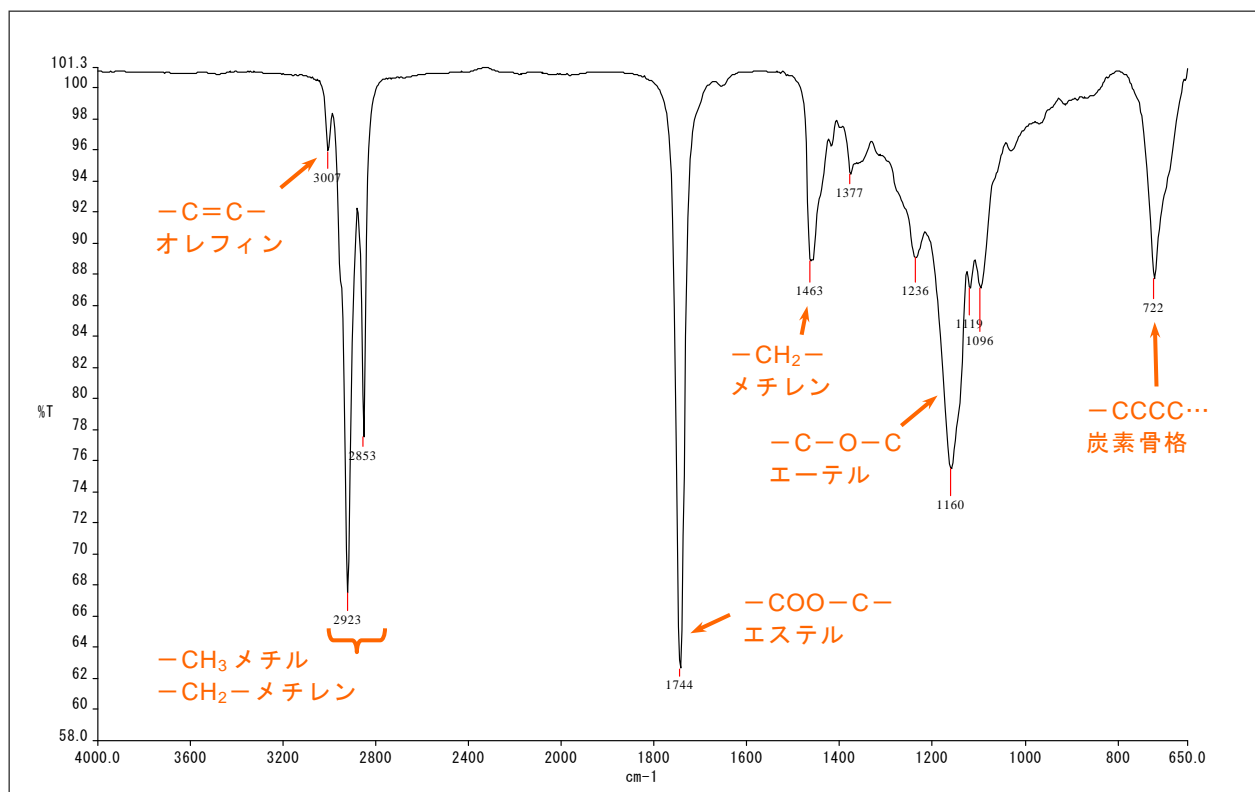


図2 油脂の代表的なスペクトル（ナタネ油）



表1 固形油脂

※ 脂肪酸組成は油脂化学便覧から抜粋し、グラフ化した。

試料	赤外線吸収スペクトル	脂肪酸組成*	所見
牛脂			<p>炭化水素由来の2900cm<sup>-1</sup>付近の吸収とエステル由来の1744cm<sup>-1</sup>の吸収はほぼ同じ高さである。</p>
ラード			<p>牛脂とほぼ同じプロファイルで、脂肪酸組成も類似している。</p>
マーガリン			<p>水分の吸収を有しているが、その他の部分は牛脂及びラードとプロファイルはほぼ同等である。 マーガリンの原料である植物油は3～4種類がブレンドされているとのこと。</p>
発酵バター 原料クリームを乳酸発酵させてから分離したもの		<p>(データなし)</p>	<p>水分の吸収が大きい、その他の部分はプロファイルがマーガリンや牛脂等と同等である。</p>
バター			<p>炭化水素とエステルの比率が上記の試料と異なっている。 脂肪酸組成からして、飽和炭化水素の含有率が高いことが影響している。</p>

表 2-1 液状油脂

試料	赤外線吸収スペクトル	脂肪酸組成
なたね油		
ベニバナ油 (サフラワ ー油)		
綿実油		
コメ油		
大豆油		

表 2-2 液状油脂

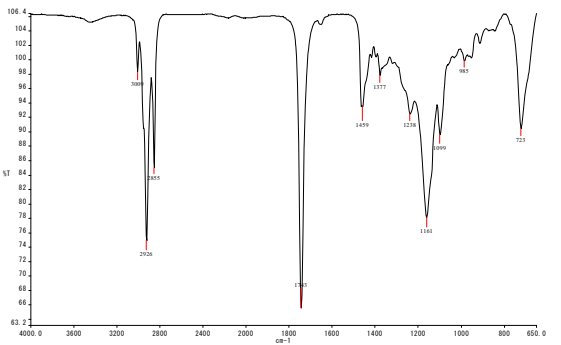
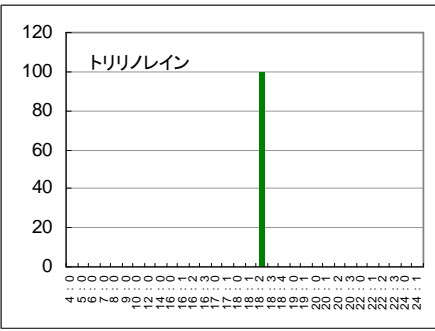
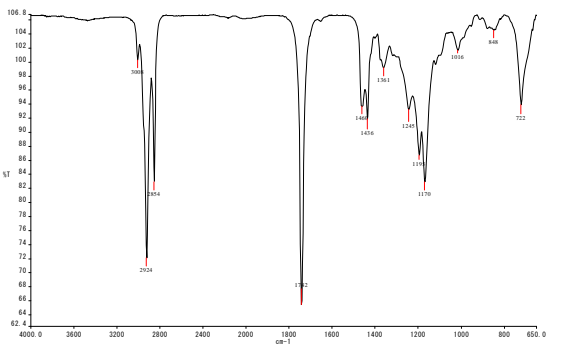
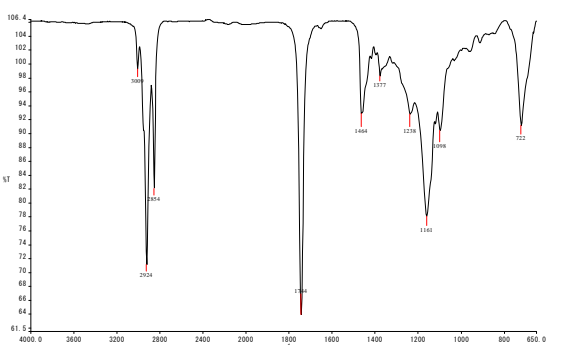
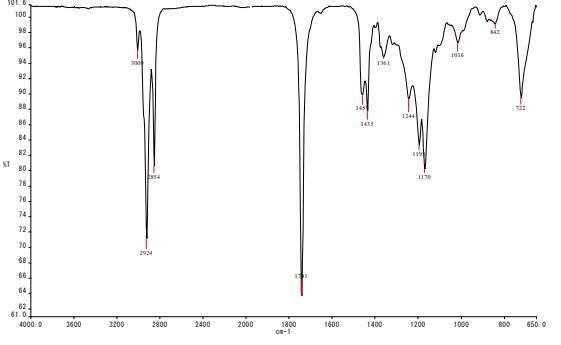
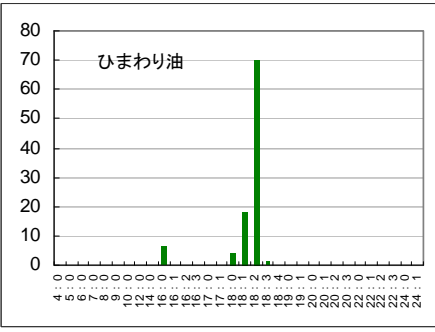
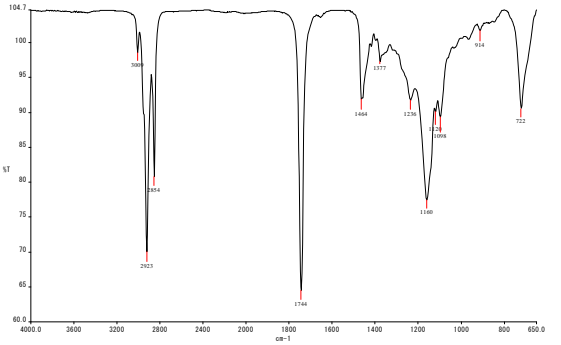
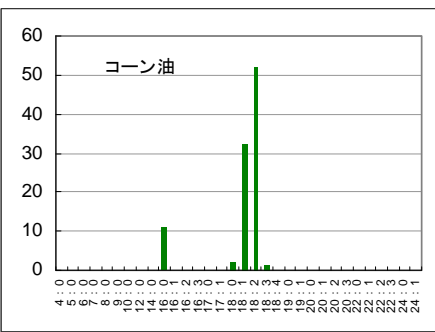
試料	赤外線吸収スペクトル	脂肪酸組成
トリリノレ イン		 <p>トリリノレイン</p>
廃食油		(データなし)
グレープシ ードオイル		(データなし)
ひまわり油		 <p>ひまわり油</p>
コーン油		 <p>コーン油</p>

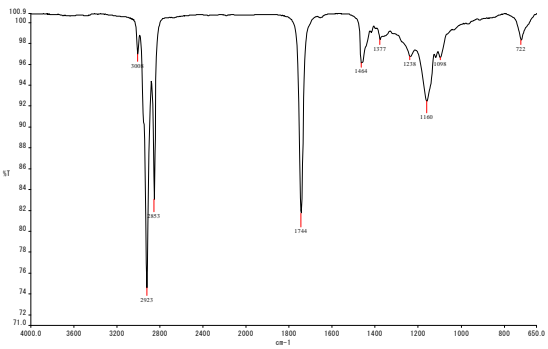
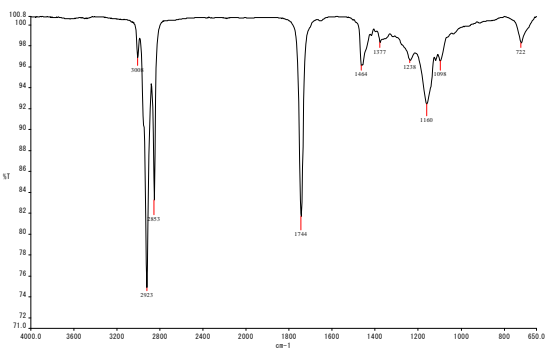
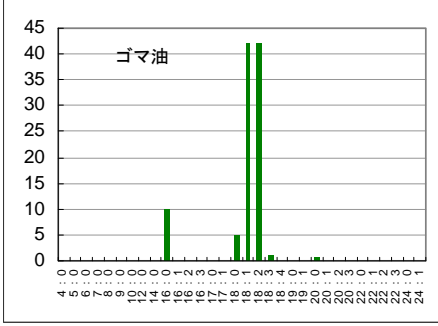
表 2-3 液状油脂

試料	赤外線吸収スペクトル	脂肪酸組成
エゴマ油		<p>エゴマ油</p>
亜麻仁油		<p>亜麻仁油</p>
エキストラバージンセサミオイル		<p>(データなし)</p>
マカダミアナッツオイル		<p>マカダミアナッツオイル</p>
アーモンド油		<p>アーモンド油</p>

表 2-4 液状油脂

試料	赤外線吸収スペクトル	脂肪酸組成
アボカドオイル		
パーム原油		
RDB パームカーネルオイル		
RDB ココナッツオイル		<p>(データなし)</p>
ジョジョバシードオイル		<p>(データなし)</p>

表 2-5 液状油脂

試料	赤外線吸収スペクトル	脂肪酸組成
白ゴマ油		(データなし)
ゴマ油		

## 繊維の熱分解ガスクロマトグラフィー

### 1. 研究目的

繊維を特定するための代表的な手法として赤外線吸収スペクトル分析があるが、2種類以上の繊維が混ざっている場合は赤外線吸収スペクトル分析では識別が困難なことがある。また、赤外線吸収スペクトル分析だけで物質特定をすることは早計であり、別手法で根拠を捉えておく必要がある。

そこで、熱分解ガスクロマトグラフィーを利用して、繊維が熱分解した時のクロマトグラムのプロフィール（形状）を標準物質と比較した。また、2種類以上の繊維の混合物のクロマトグラムは公表されておらず、単体でのクロマトグラムが単純に重なったものか不明である。

本付録では、2種類の繊維が混在する時の熱分解ガスクロマトグラムを測定した。

### 2. 分析条件

分析条件を表1に示す。測定はガスクロマトグラフ質量分析計で実施しているが、本付録では高価な機器であるガスクロマトグラフ質量分析計がなくても比較ができるようにクロマトグラムに着目した。本クロマトグラムは広く使用されているGC-FID（水素イオン化検出器）で得られたクロマトグラムと比較が可能である。

### 3. 研究結果及び考察

分析結果を表3～表5に示す。分析結果から明らかとなった事項は以下のとおりである。

#### (1) 綿の混織では綿の熱分解ピーク

が出難く、混織であるかを識別することが困難である。すなわち、綿との識別である場合、熱分解GCで確認することは今回適用した条件では難しい。熱分解温度を変えるなどの検討が必要である。

#### (2) ポリエステルは綿を除く繊維との混織ではほぼそれぞれの繊維のクロマトグラムが重なるように出現する。したがって、混織であるかを識別することが可能である。なお、ポリエステル/アクリル及びポリエステル/ナイロンの混織では単体では検出されなかった新たなピークが出現する。

#### (3) アクリルもポリエステルと同様に綿以外では単体が重なったプロフィールである。

表1 分析条件

キュリーポイントインジェクター条件	
熱分解温度・時間	590℃, 5秒
パイロロイル	F590 (鉄/コバルト/ニッケル合金)
試料量	5 mg (混繊維は1:1で混合)
GC-MS 分析条件	
カラム	DB-5MS (30m×0.25mm φ, 膜厚1.0 μm)
カラム温度	40℃・5分→15℃/分 昇温→350℃, 10分
	注入口温度: 350℃
	インターフェイス温度: 200℃
キャリアガス	ヘリウム
流量	3.2 mL/分
モード	スプリット (25:1)
トータルフロー	85 mL/min
線速度	65 cm/sec

表2 分析サンプル（繊維の組み合わせ）

試料	綿	ポリエステル	アクリル	ナイロン	ウール
綿	○				
ポリエステル	○	○			
アクリル	○	○	○		
ナイロン	○	○	○	○	
ウール	○	○	○	○	○

#### 4. 所見

2種類の繊維を含む試料を熱分解ガスクロマトグラフィーで分析すると、化学繊維では単体におけるクロマトグラムどうしが重なった（混ざった）クロマトグラムが得られた。したがって、化学繊維どうしの熱分解ガスクロマトグラムから何種類の繊維が含まれているのか、あるいはどのような繊維が含まれているのかを明らかにすることが可能である。

しかし、綿を含む繊維では、綿由来のピークが現れ難く、綿が含まれていることが判断できない。したがって、綿を含む繊維では識別は困難である。

#### 5. 課題

- (1) 熱分解温度などの条件を変えることによって、どのような違いが現れるかを確認し、より好ましい繊維を定性するための分析条件を見出す。
- (2) 本研究で対象サンプルとなったものは繊維であるが、高分子で、かつ、赤外線吸収スペクトル分析以外に分析することが難しいもの（セルロース、プラスチック、ゴム、タンパク質など）の熱分解ガスクロマトグラムを充実させる。



表3 綿とその他繊維 …… 綿の混織(1:1)の熱分解クロマトグラムには綿由来のピークが現れ難い。したがって、綿との混織であることは熱分解ガスクロマトグラムのプロフィールだけでは判別し難い。

綿とナイロン	綿とウール	綿とポリエステル	綿とアクリル
<p>綿とナイロンの混織の熱分解クロマトグラムはほぼナイロンと同等であり、綿に特有のピークは殆ど検出されていない。</p>	<p>綿とウールの混織の熱分解クロマトグラムはウールとプロフィールが類似しており、綿に特有のピークは極めて僅かである。</p>	<p>綿とポリエステルの混織の熱分解クロマトグラムはポリエステルとプロフィールが極めて類似しており、綿特有のピークはほとんど検出されていない。</p>	<p>綿とアクリルの混織の熱分解クロマトグラムはアクリルとほぼ同等であるが、僅かに綿に特有のピークが表れている。</p>

表4 ポリエステルとその他繊維

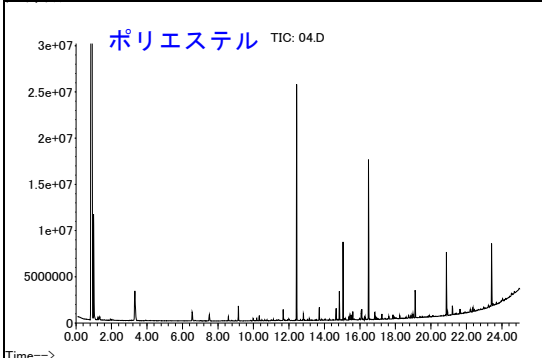
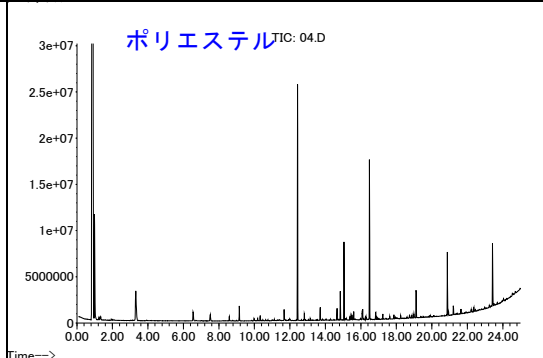
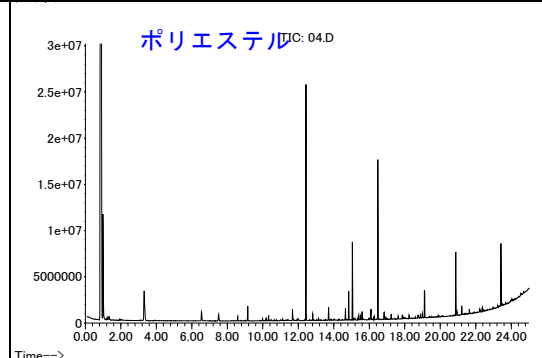
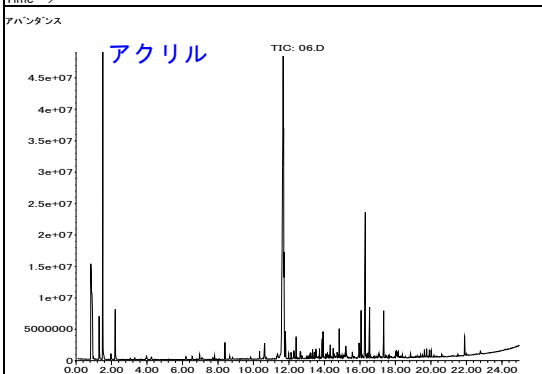
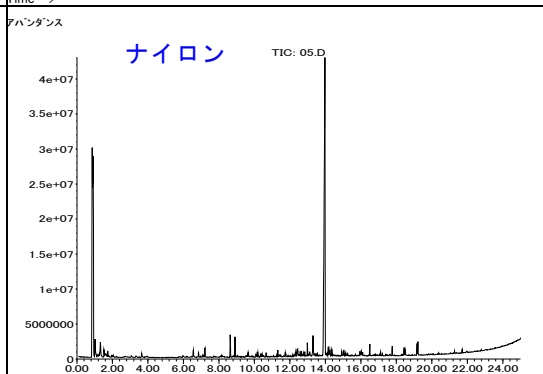
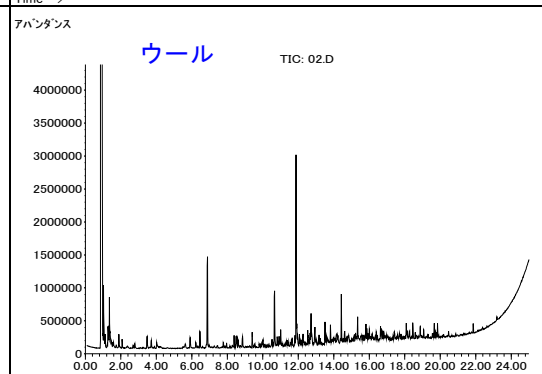
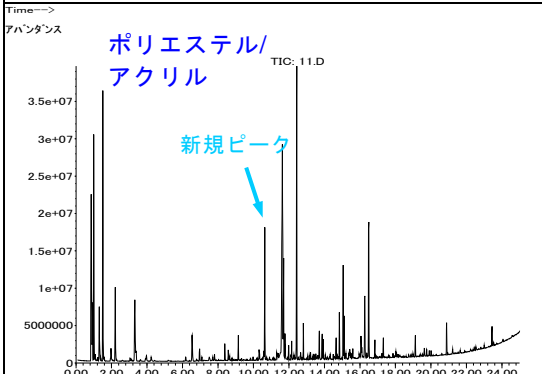
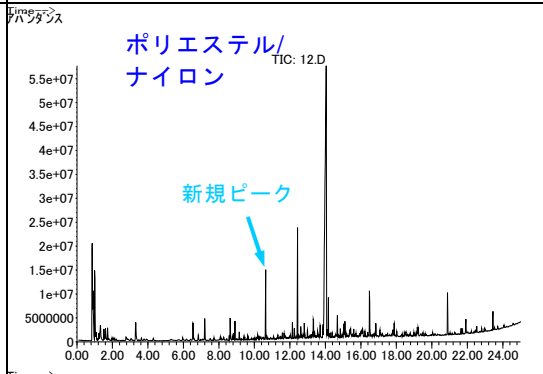
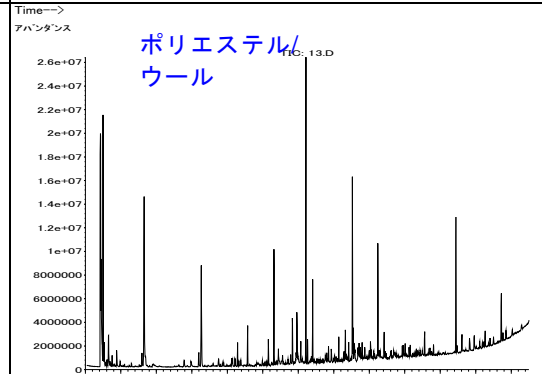
アハングス ポリエステルとアクリル	アハングス ポリエステルとナイロン	アハングス ポリエステルとウール	
 <p>ポリエステル TIC: 04.D</p>	 <p>ポリエステル TIC: 04.D</p>	 <p>ポリエステル TIC: 04.D</p>	
 <p>アクリル TIC: 06.D</p>	 <p>ナイロン TIC: 05.D</p>	 <p>ウール TIC: 02.D</p>	
 <p>ポリエステル/ アクリル TIC: 11.D</p> <p>新規ピーク</p>	 <p>ポリエステル/ ナイロン TIC: 12.D</p> <p>新規ピーク</p>	 <p>ポリエステル/ ウール TIC: 13.D</p>	<p>ポリエステルと化学繊維の混織の熱分解ガスクロマトグラムは、両試料のクロマトグラムが混ざった形で見出されたが、単体では見られなかった新しい物質ピークが見出された。ただし、ポリエステルと綿の混織では新規ピークは見られなかった。</p>
<p>ポリエステルとアクリルの混織の熱分解ガスクロマトグラムは両試料のクロマトグラムが混ざった形で出てきているが、単体では検出されないピークが比較的強度が高く検出されている。</p>	<p>ポリエステルとナイロンの混織の熱分解ガスクロマトグラムは両試料のクロマトグラムが混ざった形で出てきているが、単体では検出されないピークが比較的強度が高く検出されている。</p>	<p>ポリエステルとウールの混織の熱分解ガスクロマトグラムは両試料のクロマトグラムが混ざった形で出てきている。</p>	

表5 その他繊維の組合せ

アクリルとウール	アクリルとナイロン	ナイロンとウール	
			<p>2種類以上の繊維のうち、一方が綿である場合は、綿由来のピークは極めて小さく、検出しにくい。同様にウールも若干その蛍光があり、化学繊維に比べて2種類以上の繊維の熱分解 GC 上には現れ難い。</p>
<p>アクリルとウールの混織の熱分解ガスクロマトグラムはアクリルのクロマトグラムと類似しており、ウール由来のピークは僅かである。</p>	<p>アクリルとナイロンの混織の熱分解ガスクロマトグラムは両試料が混ざった形となっている。</p>	<p>ナイロンとウールの混織の熱分解ガスクロマトグラムはナイロンのクロマトグラムと類似しており、ウール由来のピークは殆どない。</p>	

## 芳香族化合物の UV スペクトル

芳香族化合物の紫外線吸収スペクトル (UV スペクトル) には 260 nm 付近に特徴的な山型のピークが出現するが、置換基の違いによりその形状は異なるものとなる。

分子構造の異なる芳香族化合物について UV スペクトルを測定し、スペクトルの僅かな違いを見出した。芳香族化合物の UV スペクトルを図 1～図 7 に示す。測定結果から明らかとなった事項は以下の通りである。

## 測定条件

- 試料溶媒： シクロヘキサン (蛍光分析用)
- リファレンスセル： なし
- ブランク： 水
- 濃度単位： ppm ( $\mu\text{g/mL}$ )

- ベンゼンの 1 つの水素がメチル基あるいはエチル基あるいはブチル基に置換されても、UV スペクトルの波長シフトは殆ど見られない。すなわち、トルエン、エチルベンゼン、*n*-プロピルベンゼン及び *n*-ブチルベンゼンの吸収ピークの見かけの波長 (プロフィール) は近似している。
- ベンゼンの 1 つの水素がメチル基に置換された化合物であるトルエンは、ベンゼン特有の山型ピークがブロードになり、かつ、長波長側へシフトしている。さらに、メチル基の数が増えるにつれ、さらに吸収ピークは長波長側へシフトする。
- キシレンの異性体を比較すると、メチル基の置換位によってスペクトルは異なる。オルト、メタ、パラの順で長波長側にシフトしている。
- 置換基の分岐の有無によって僅かにスペクトルに変化が見られた。置換基に分岐があると直鎖のものよりも吸収ピークが短波長側に僅かにシフトする。

## 【課題】

- (1) 追加情報として、芳香族化合物の 200 nm 付近のスペクトルの違いを明らかにする。(高速液体クロマトグラフィーの検出条件に有用な化学情報となる。)
- (2) アセトン、メチルエチルケトン等のケトン化合物に見られる *n* 電子遷移に基づく溶媒の違いによる吸収波長のシフトを観察する。

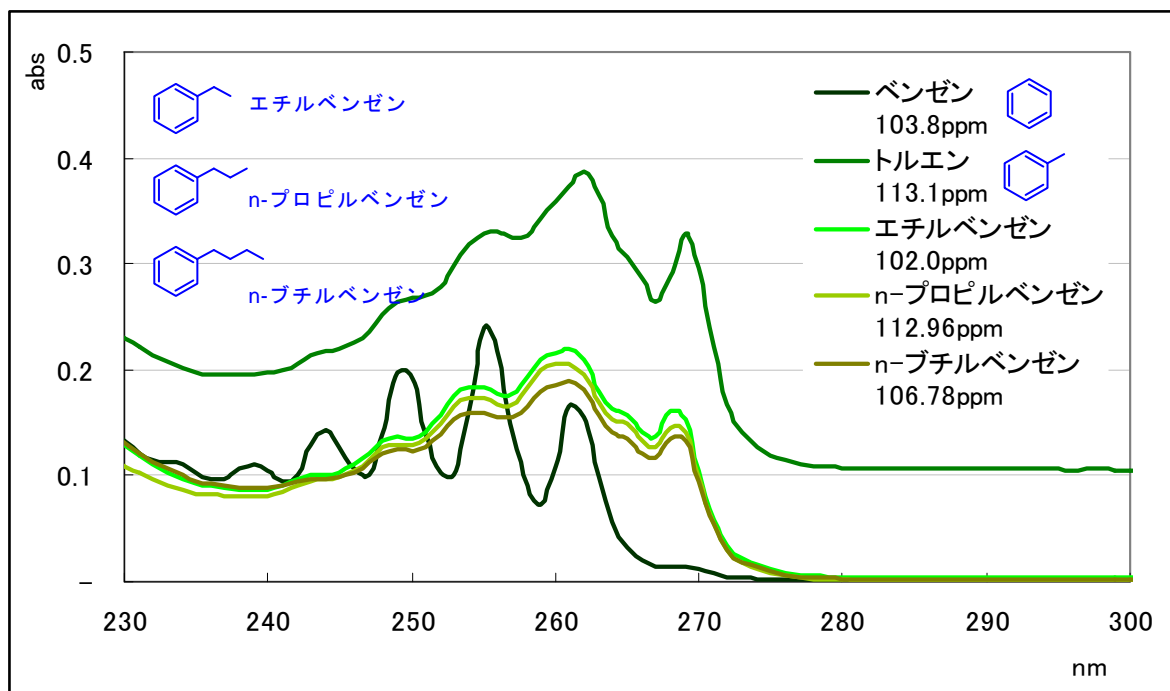


図 1 直鎖炭化水素置換基

ベンゼンにメチル基が一つ置換したトルエンはベンゼンと大きくスペクトルが異なっている。さらに、エチル基、プロピル基、ブチル基と置換基の直鎖炭化水素の鎖長が長くなってもほぼ同等のスペクトルであった。

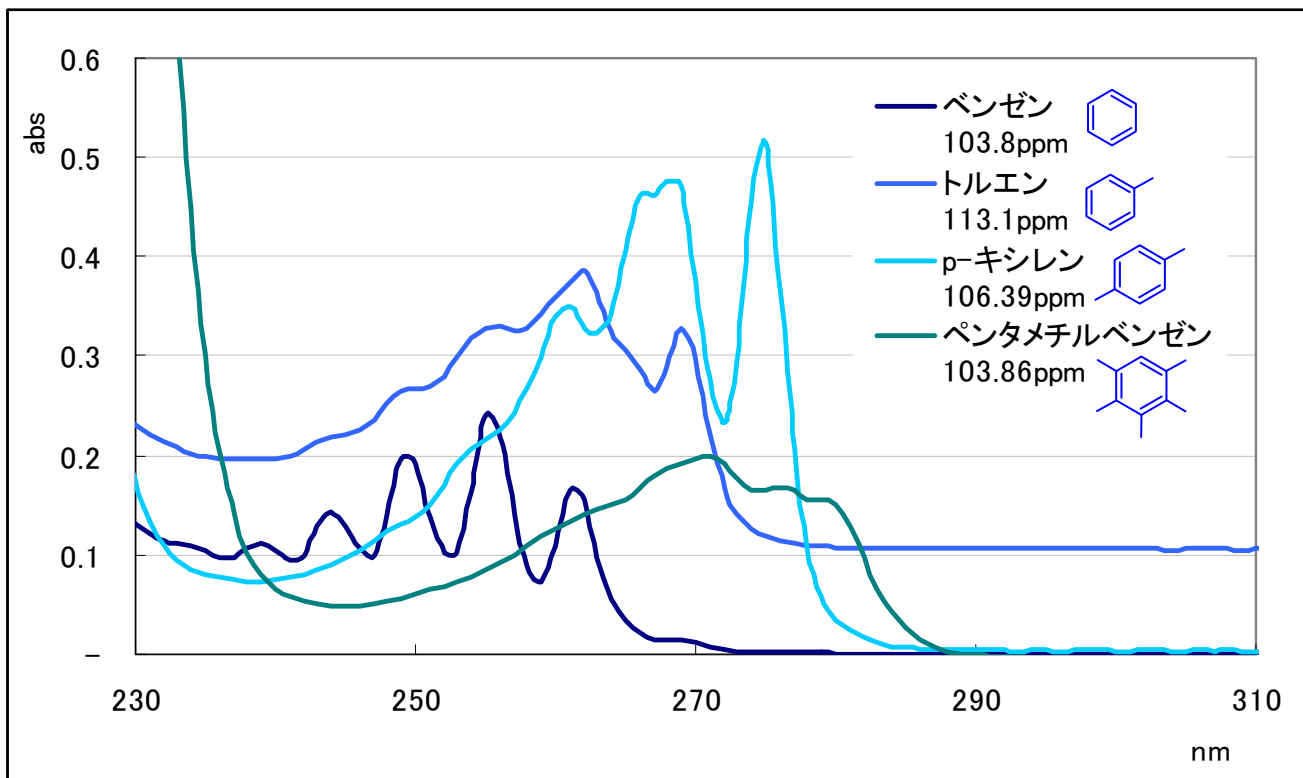


図2 置換基の数の違い

ベンゼン環にメチル基が数多く置換されるほど、山型ピークが長波長側へシフトしている。

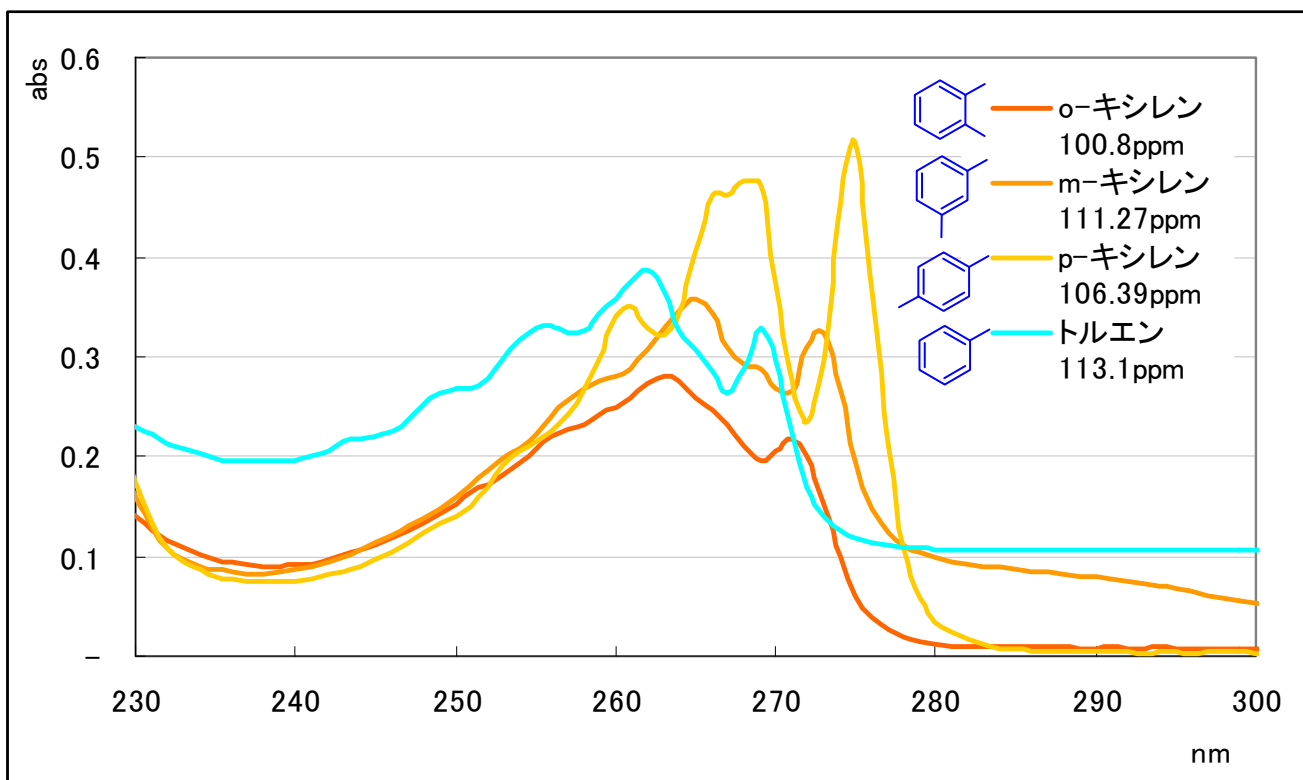


図3 トルエンとキシレン（配位の違い）

トルエンよりもキシレンは長波長側へシフトしている。  
 キシレンはメチル基の配位位置によってスペクトルが異なっており、特にパラ位にメチル基が置換した p-キシレンはプロファイルが大きく異なる。  
 キシレンに着目すると、オルト、メタ、バラの順に長波長側へ吸収ピークがシフトしている。

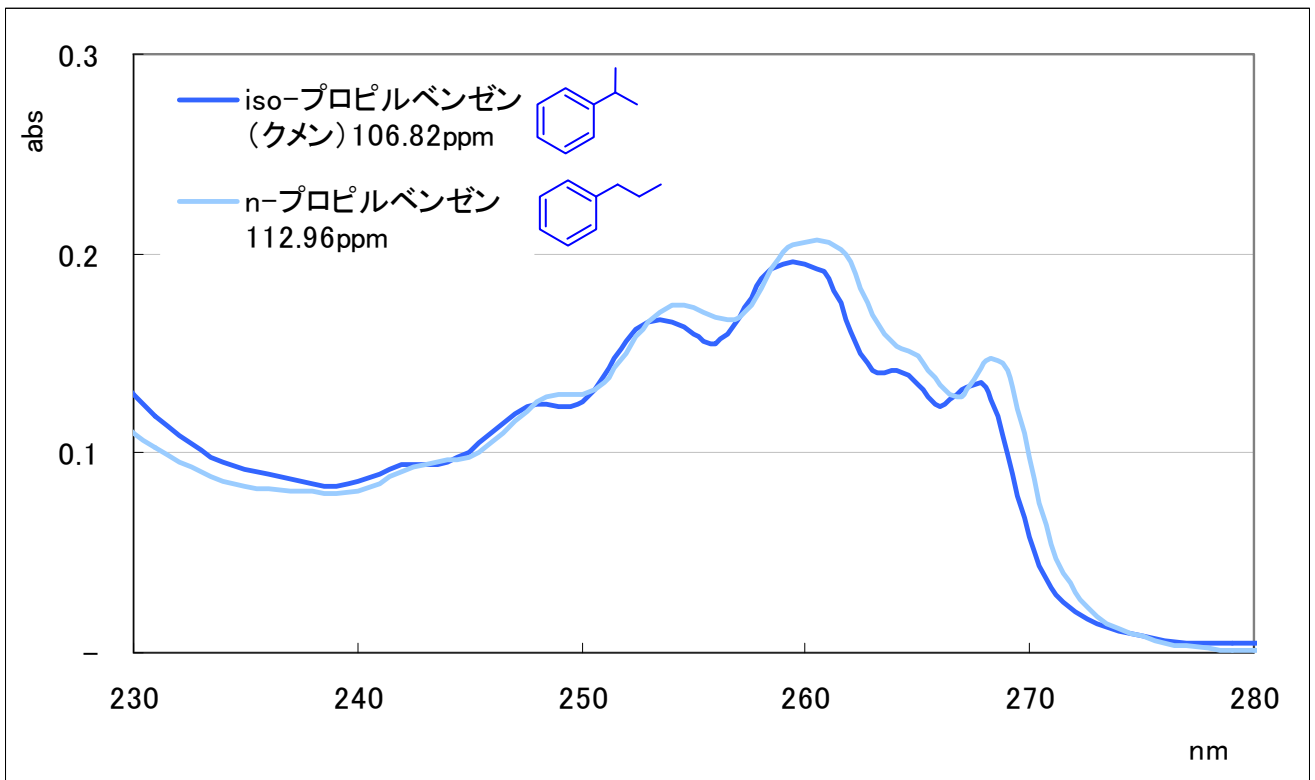


図4 直鎖型と分岐型

置換基が分岐型 (iso-) の方が 260 nm 付近のピークトップが僅かに短波長側にシフトしている。

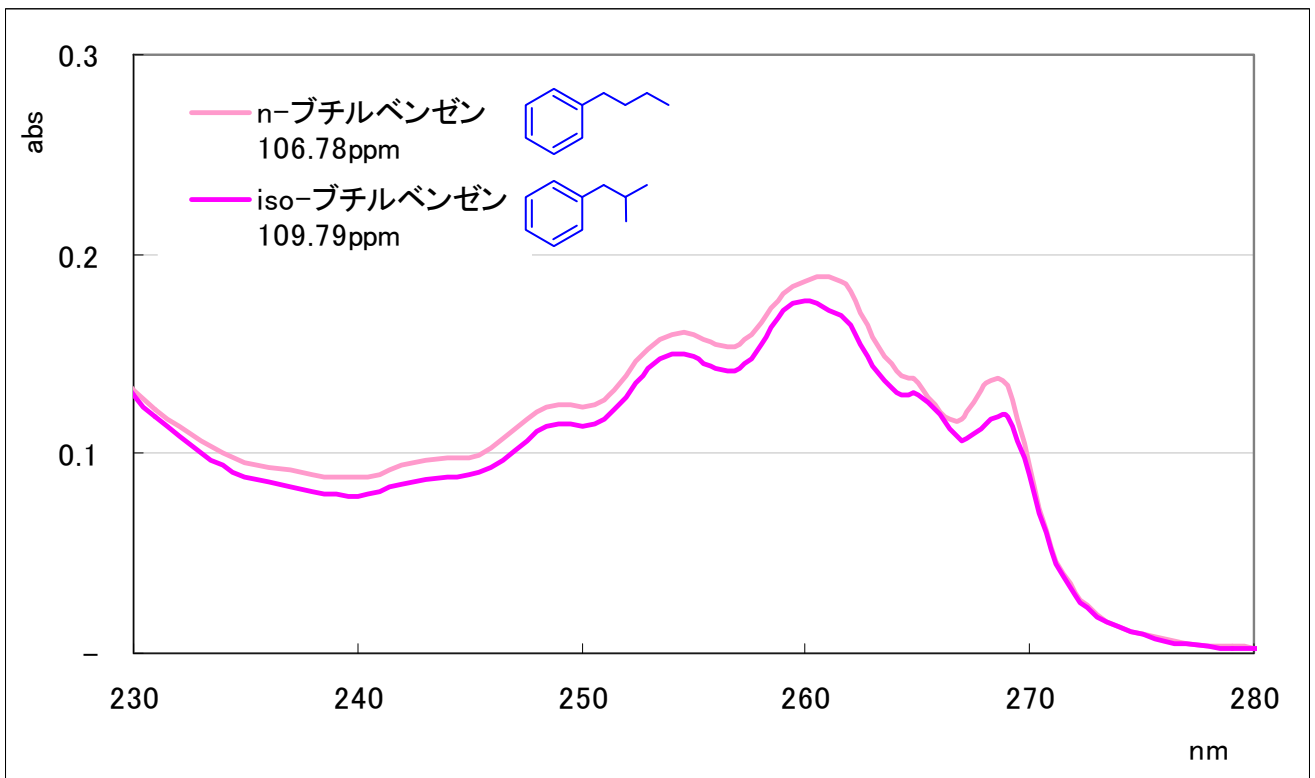


図5 直鎖型と分岐型

置換基が分岐型 (iso-) の方が 260 nm 付近のピークトップが僅かに短波長側にシフトしている。

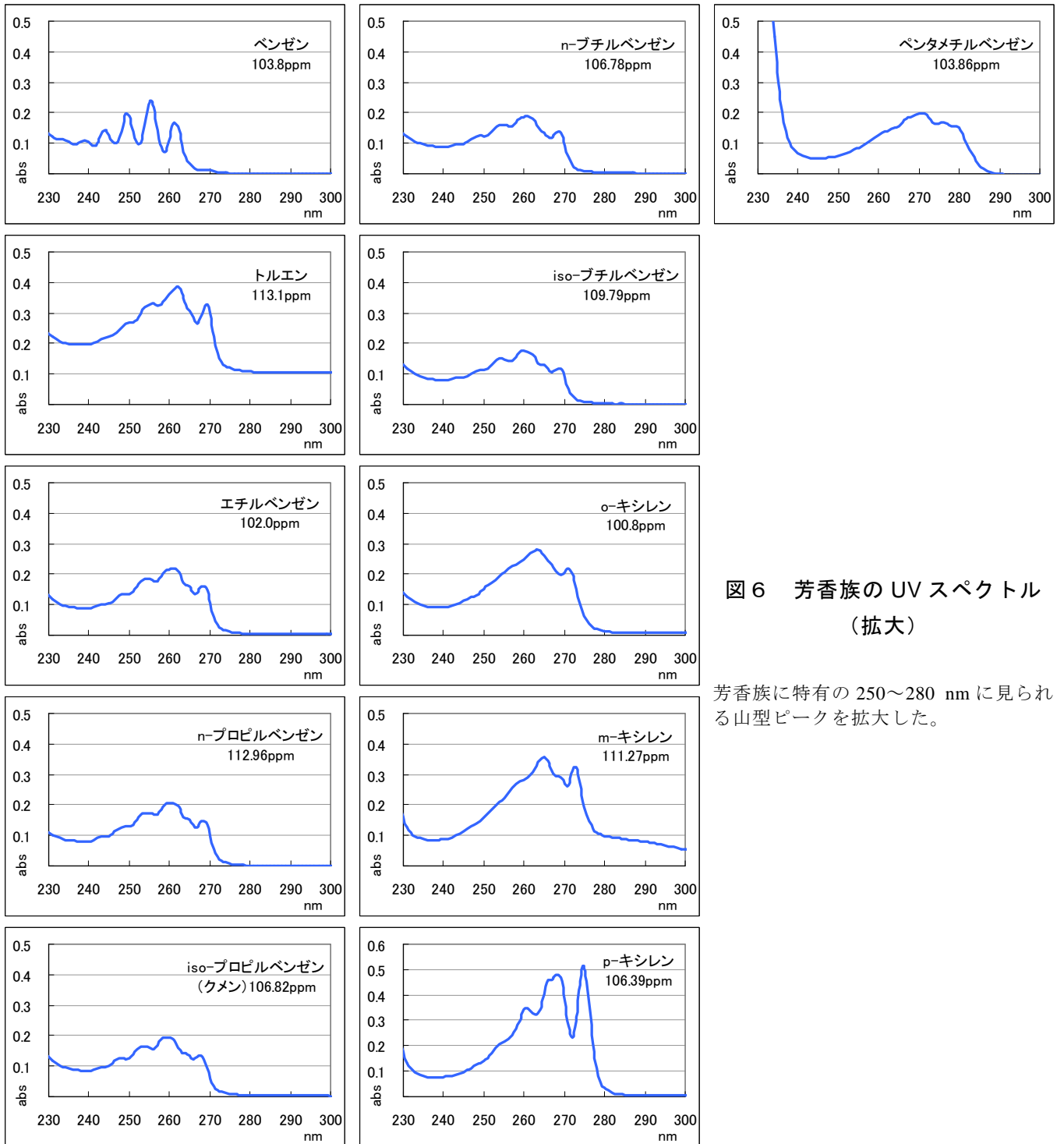


図6 芳香族のUVスペクトル  
(拡大)

芳香族に特有の250~280 nmに見られる山型ピークを拡大した。

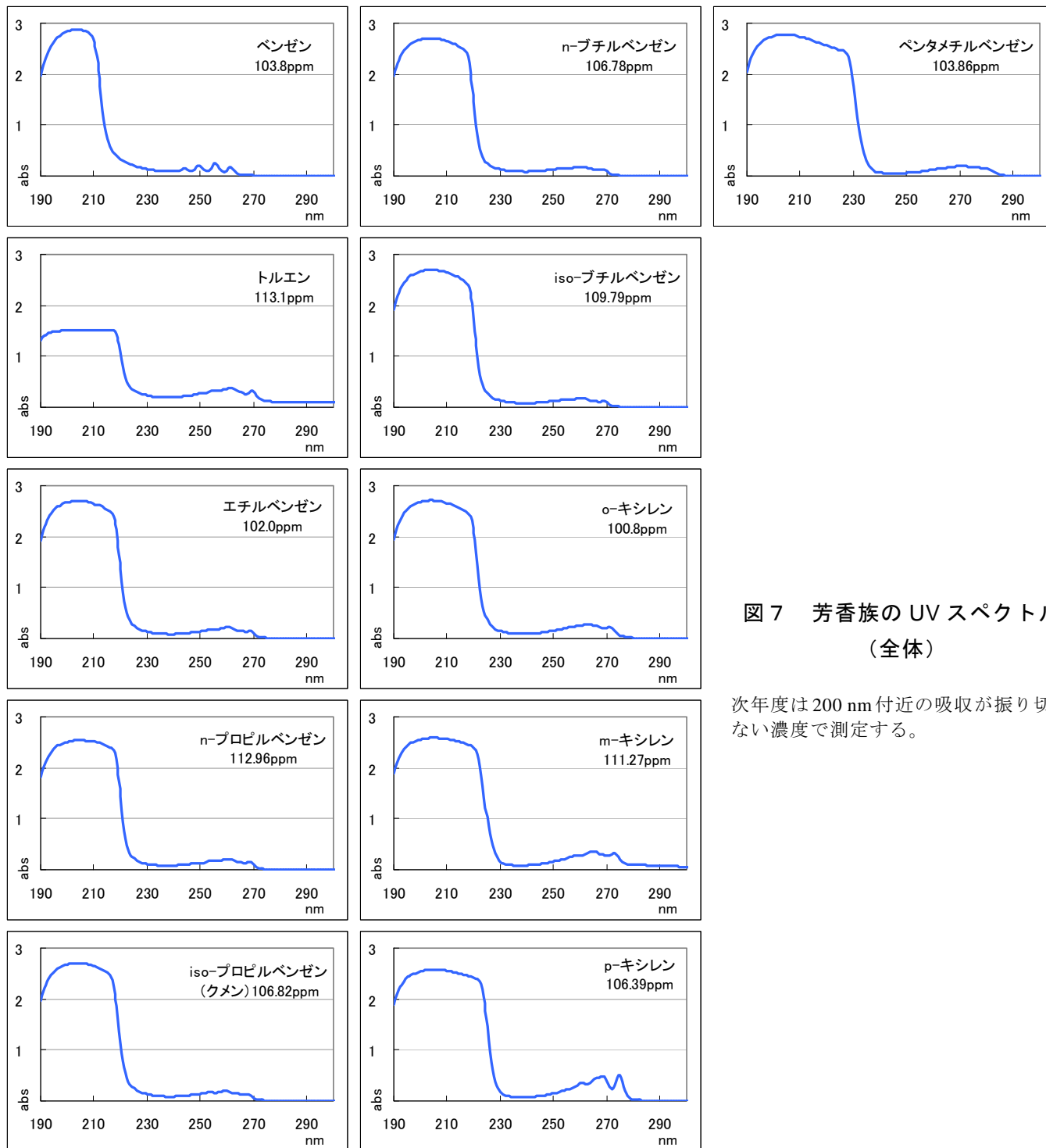


図7 芳香族のUVスペクトル  
(全体)

次年度は200 nm付近の吸収が振り切れない濃度で測定する。