

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 25 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

付録 6 フッ素樹脂の熱分解ガスクロマトグラフィー

付録 7 アミノ酸の IR スペクトルの比較

付録 8 糖類の構造と赤外線吸収スペクトル

※ 付録 1～5：平成 23 年度，付録 6～8：平成 24 年度

1. 研究の目的

本研究の目的は、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することである。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。

2. 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。

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。

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	2012 年度（本年度）
1. 赤外線吸収スペクトル分析	394	438
2. 熱重量-示差熱分析	91	68
3. 紫外線吸収スペクトル分析	34	0
4. ガスクロマトグラフ分析	36	0
5. X 線回折	9	109
小計（延べ）	564 物質	615 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。2012 年度の付録では 3 テーマについて公開する。

3. 研究の経過（スケジュール）

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 高度化の可能性についての検討

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 615 検体のサンプルについてスペクトルを得た。

分析	試料分類	測定数	合計
赤外線吸収スペクトル分析	炭化水素	138	438
	アルコール	78	
	エステル	117	
	アルデヒド・ケトン	50	
	エーテル	55	
熱重量-示差熱分析	化学品（有機物）	7	68
	無機物	22	
	糖類	15	
	タンパク質・アミノ酸	24	
	プラスチック・ゴム・繊維等	6	
	食品	4	
X線回折	硫酸塩	37	109
	炭酸塩	9	
	酢酸塩	8	
	硝酸塩	6	
	臭素酸塩	4	
	塩素酸塩	7	
	リン酸塩	14	
	ヨウ素酸塩	5	
	モリブデン酸塩	1	
	ホウ酸塩	4	
	フッ化水素酸塩	2	
	バナジン酸塩	1	
	チオシアン酸塩	2	
	スルファミン酸塩	1	
	ケイ酸塩	4	
	クロム酸塩	3	

※ 次頁の分析名（青字）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. 'cis-デカヒドロナフタレン
2. 'trans-デカヒドロナフタレン
3. 1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン
4. 1,2,3-トリクロロベンゼン
5. 1,2,3-トリメチルベンゼン
6. 1,2-ジメチルナフタレン
7. 1,3,5-トリクロロベンゼン
8. 1,3-ジメチルナフタレン
9. 1,4-ジメチルナフタレン
10. 1,5-ジメチルナフタレン
11. 1,8-ジメチルナフタリン
12. 1-オクテン
13. 1-ブロモナフタレン
14. 1-ヘプテン
15. 1-メチルナフタレン
16. 2,2,3-トリメチルブタン
17. 2,2,4,4,6,8,8-ヘプタメチルノナン
18. 2,2,4,6,6-ペンタメチルヘプタン
19. 2,2,4-トリメチル-1-ペンテン
20. 2,2,4-トリメチルペンタン
21. 2,2-ジメチルブタン
22. 2,3-ジメチルナフタレン
23. 2,3-ジメチルブタン
24. 2,4-ジメチルペンタン
25. 2,6,10,14-テトラメチルペンタデカン
26. 2,6-ジメチルナフタレン
27. 2,7-ジメチルナフタレン
28. 2-エチル-1-ヘキセン
29. 2-エチル-p-キシレン
30. 2-エチルトルエン
31. 2-メチル-1H-インデン
32. 2-メチル-1-ベンゼン
33. 2-メチル-2-ブテン
34. 2-メチルウンデカン
35. 2-メチルスチレン
36. 2-メチルナフタレン
37. 2-メチルブタン
38. 3a,4,7,7a-テトラヒドロインデン
39. 3-ヘキサン
40. 3-メチルスチレン
41. 3-メチルヘキサン
42. 3-メチルヘプタン
43. 3-メチルペンタン
44. 4-エチル-o-キシレン
45. 4-エチルトルエン
46. 4-ビニル-1-シクロヘキセン
47. 4-メチルスチレン
48. 5-イソプロピル-m-キシレン
49. 9-メチルアントラセン
50. B-カリオフィレン
51. m-ジビニルベンゼン
52. n-ウンデカン
53. n-エイコサン
54. n-オクタコサン
55. n-オクタデカン
56. n-オクタン
57. n-オクチルベンゼン
58. n-デシルベンゼン
59. n-テトラコサン
60. n-テトラデカン
61. n-テトラデシルベンゼン
62. n-ドコサン
63. n-ドデカン
64. n-ドtriaコンタン
65. n-triaコンタン
66. n-トリコサン
67. n-トリデカン
68. n-トリデシルベンゼン
69. n-ノナデカン
70. n-ノナン
71. n-ヘキサデカン
72. n-ヘキサtriaコンタン
73. n-ヘプタデカン
74. n-ヘプチルベンゼン
75. n-ヘンエイコサン
76. n-ペンタコサン
77. n-ペンタデカン
78. n-ペンタン
79. n-ヘントriaコンタン
80. o,o-ビフェニル
81. p,p-ビフェニル
82. p-キシレン
83. α-オレフィン C12
84. α-オレフィン C14
85. α-オレフィン C16
86. α-メチルスチレン
87. β-メチルスチレン
88. アスファルテン
89. アセナフテン
90. アリルベンゼン
91. インダン
92. インデン
93. ウンデカン
94. ウンデシルベンゼン
95. エチルシクロヘキサン
96. カーボンブラック
97. クメン
98. クリセン標準品
99. クレオソート油
100. コレスタン
101. ジ-iso-ブチレン(異性体混合物)
102. シクロオクタン
103. シクロヘキサン
104. シクロヘキセン
105. シクロヘプタン
106. シクロペンタン
107. ジビニルベンゼン
108. ジフェニル
109. テトラコンタン
110. テトラテトラコンタン
111. ドデシルベンゼン
112. ドtriaコンタン
113. triaコンタン
114. トリフェニルアルシン
115. トリフェニルメタン
116. ノナコサン
117. ノルボルナン
118. パラフィン
119. ビシクロヘキシル
120. ビニルトルエン
121. フェニルアセチレン
122. フェロセン[ビス(シクロペンタジエニル)鉄(Ⅱ)]
123. ブチルベンゼン
124. ブライトストック
125. プロピレン四量体
126. ヘキサコサン
127. ヘキサメチルベンゼン
128. ヘキシルシクロヘキサン
129. ヘプタコサン
130. ヘプタデカン
131. ヘンエイコサン
132. ペンタコサン
133. ペンタデカン
134. ヘントriaコンタン
135. マイクロクリスタリンワックス
136. メチルシクロペンタン
137. メチレンシクロヘキサン
138. 潤滑油

アルコール

1. (-)-メントール
2. (±)-2-メチル-1-ブタノール
3. 1,1,1,3,3,3-ヘキサフルオロ-2-プロパノール
4. 1,3-プロパンジオール
5. 1,4-ブタンジオール
6. 1,5-ペンタンジオール
7. 1-ウンデカノール
8. 1-オクタデカノール
9. 1-オクタノール
10. 1-ドコサノール
11. 1-ドデカノール
12. 1-ノナデカノール
13. 1-ノナノール
14. 1-ブトキシ-2-プロパノール
15. 1-ヘプタデカノール
16. 1-ヘプタノール
17. 1-ペンタデカノール
18. 1-ペンタノール
19. 1-ペンテン-3-オール
20. 2-(2-ブトキシプロポキシ)プロパノール
21. 2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタンジオール
22. 2,2-ジメチル-1-プロパノール
23. 2,4-ジ-tert-ブチルフェノール

24. 2,5-ヘキサンジオール	エステル	56. トリステアリン
25. 2,6-ジメチル-4-ヘプタノール	1. 2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタンジオールジイソビチラート	57. パルミチン酸エチル
26. 2,6-ジメトキシフェノール	2. 3-エトキシプロピオン酸エチル	58. パルミトオレイン酸メチル
27. 2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール	3. D(+)-グルクロノラクトン(D-グルクノン酸 γ -ラクトン)	59. ピバリン酸ビニル
28. 2-アミノペンタノール	4. n-オクタ酸エチル	60. フタル酸ジ-n-アミル
29. 2-エチル-1,3-ヘキサンジオール	5. n-デカン酸エチル	61. フタル酸ジ-n-オクチル
30. 2-ジメチルアミノエタノール	6. n-酪酸 2-エチルヘキシル	62. フタル酸ジ-n-ブチル
31. 2-フェニル-2-プロパノール (DMPC)	7. n-酪酸 n-ブチル	63. フタル酸ジ-n-プロピル
32. 2-フェニルエチルアルコール	8. n-酪酸 n-プロピル	64. フタル酸ジ-n-ヘキシル
33. 2-フェノキシエタノール	9. n-酪酸 イソブチル	65. フタル酸ジイソデシル
34. 2-プロパノール	10. n-酪酸 イソプロピル	66. フタル酸ジイソブチル
35. 2-ヘキサノール	11. n-酪酸 エチル	67. フタル酸ジイソプロピル
36. 2-メチル-1-プロパノール	12. n-酪酸 メチル	68. フタル酸ジエチル
37. 2-メチル-3-ブテン-2-オール	13. p-ヒドロキシ安息香酸 2-エチルヘキシル	69. フタル酸ジシクロヘキセン
38. 2-メチルイソボルネオール	14. p-ヒドロキシ安息香酸 n-プロピル	70. フタル酸ジノニル
39. 3(2)- α -ブチル-4-ヒドロキシアニソール	15. p-ヒドロキシ安息香酸エチル	71. フタル酸ジヘプチル
40. 3,4-キシレノール	16. p-ヒドロキシ安息香酸メチル	72. フタル酸ジメチル
41. 3,5-ジメチルベンジルアルコール	17. α -ヒドロキシイソ酪酸メチル	73. フタル酸ベンジル n-ブチル
42. 3-ペンタノール	18. アクリル酸 2-エチルヘキシル	74. プロピオン酸 n-プロピル
43. 3-メチル-1,5-ペンテンジオール	19. アクリル酸 n-ブチル	75. プロピオン酸イソプロピル
44. 3-メチル-2-ペンタノール	20. アクリル酸 イソブチル	76. プロピオン酸エチル
45. 3-メチル-3-ブテン-1-オール	21. アクリル酸 エチル	77. プロピオン酸ビニル
46. 3-メトキシ-1-ブタノール	22. アクリル酸 メチル	78. ヘキサ酸エチル
47. 3-メトキシ-3-メチルブタノール	23. アジピン酸ジイソデシル	79. ヘプタデカン酸メチル
48. 4,4'-ジヒドロキシジフェニルメタン	24. アジピン酸ジメチル	80. ベヘン酸メチル
49. 4,6-ジ-tert-ブチル-2-メチルフェノール	25. アジピン酸ビス(2-エチルヘキシル)	81. ミリスチン酸エチル
50. 4-アリル-2,6-ジメトキシフェノール	26. アセト酢酸メチル	82. メタクリル酸 n-ブチル
51. 4-イソプロピルフェノール	27. アラクジン酸エチル	83. メタクリル酸 tert-ブチル
52. 4-メチル-1,3-ジオキサン	28. アラクジン酸メチル	84. メタクリル酸イソプロピル
53. 4-メチル-2-ペンタノール	29. イソ酪酸フェニル	85. メタクリル酸エチル
54. 5-メチルフルフリルアルコール	30. イソ酪酸ブチル	86. メタクリル酸メチル
55. cis-3-ヘキセン-1-オール	31. ウンデカン酸メチル	87. メトキシ酢酸メチル
56. DL-2-メチル-1-ブタノール	32. エチリデンジアセテート	88. モノエライジン
57. L-メントール	33. オレアミド(オレイン酸アミド)	89. モノオレイン
58. n-トリデシルアルコール	34. オレイン酸エチル	90. モノステアリン酸グリセロール
59. n-ノニルアルコール	35. ギ酸エチル	91. モノパルミチン
60. tert-アミルアルコール	36. グルタル酸ジメチル	92. ヤシ油
61. tert-ブタノール	37. クロトン酸 n-ブチル	93. ラウリン酸エチル
62. ゲラニオール	38. クロトン酸 イソプロピル	94. ラウリン酸ビニル
63. ジアセトンアルコール	39. クロトン酸エチル	95. リグノセリン酸メチル
64. ジオスミン	40. クロトン酸ビニル	96. リノール酸エチル
65. ジグリセリン	41. クロトン酸メチル	97. リン酸トリ-m-クレジル
66. シクロヘキサメタノール	42. クロロ酢酸ビニル	98. リン酸トリ-o-クレジル
67. ジプロピレングリコール	43. コハク酸イミド	99. リン酸トリ-p-クレジル
68. ステグマステロール	44. コハク酸ジエチル(コハク酸エチル)	100. リン酸トリクレジル
69. ステアリルアルコール	45. コハク酸ジメチル	101. リン酸トリス(4-tert-ブチルフェニル)
70. セチルアルコール	46. 酢酸 2-メチルブチル	102. リン酸トリフェニル
71. テトラエチレングリコール	47. サリチル酸ベンジル	103. 安息香酸メチル
72. トリデカノール	48. サリチル酸メチル	104. 牛脂
73. トリメチロールエタン	49. ジステアリン酸グリセロール	105. 酢酸(±)- α -トコフェロール(酢酸 DL- α -トコフェロール)(ビタミン E 酢酸エステル)
74. トリメチロールプロパン	50. シュウ酸アンモニウム-水和物	106. 酢酸 1-メチルブチル(酢酸 s-ベンチル)
75. ノナノール	51. ステアリン酸エチル	107. 酢酸 2-エチルヘキシル
76. ヘキサメチレングリコール	52. ステアリン酸ステアリル	108. 酢酸 2-ヒドロキシエチル
77. リナノール	53. ステアリン酸リチウム	109. 酢酸 n-ブチル
78. ロイコキニザリン	54. デカン酸エチル	110. 酢酸イソアミル
	55. トリエライジン	111. 酢酸イソブチル

112. 酢酸イソプロピル
113. 酢酸リナリル
114. 没食子酸 n-プロピル
115. 硫酸ジ-n-ブチル
116. 硫酸ジエチル
117. 硫酸ジメチル

アルデヒド・ケトン

1. (S)-(+)-カルボン
2. 1-オクタナール(n-オクチルアルデヒド)
3. 2,3-ペンタンジオン
4. 2-ウンデカノン
5. 2-エチルヘキシルアルデヒド
6. 2-エトキシエチルアセトン
7. 2-ヘプタノン
8. 2-メチル-2-ヘプテン-6-オン
9. 2-メチルテトラヒドロフラン-3-オン
10. 2-メチルブタナール
11. 3,3',5,5'-テトラ-tert-ブチル-4,4'-ジフェノキノン
12. 3-フェニルプロピオンアルデヒド
13. 3-ブテン-2-オン
14. 3-メチル-2-ブタノン
15. 3-メチル-2-ペンタノン
16. 4-カルボキシベンズアルデヒド
17. 4'-ヒドロキシ-3',5'-ジメトキシアセトフェノン
18. 4-ヒドロキシベンズアルデヒド
19. 4-ヘプタノン
20. 4-メチル-2-ペンタノン
21. 5-ヒドロキシメチル-2-フルアルデヒド
22. 5-メチル-2-フルフラール
23. 6-エトキシ-2,2,4-トリメチル-1,2-ジヒドロキノリン
24. DL-グリセルアルデヒド
25. m-トルアルデヒド
26. n-カプリルアルデヒド
27. o-トルアルデヒド
28. o-フタルアルデヒド
29. p-トルアルデヒド
30. trans-2-ヘキセニルアルデヒド
31. α -n-ヘキシルケイ皮アルデヒド
32. イソパレルアルデヒド
33. イソブチルアルデヒドジエチルアセタール
34. キンヒドロン
35. クマリン
36. クミンアルデヒド
37. グリオキサール

38. サリチルアルデヒド
39. ジヒドロキシアセトン
40. シリンガルアルデヒド
41. シンナムアルデヒド(trans-3-フェニル-2-プロペナール)
42. テトラシアノエチレン
43. パラアルデヒド
44. バレルアルデヒド
45. ビンドン
46. フルフラール
47. プロピオンアルデヒド
48. ベンゾフェノン
49. メチル n-プロピルケトン
50. メチルノルマルヘキシルケトン

エーテル

1. 1,1,3-トリエトキシプロパン
2. 1,2-ジエトキシエタン
3. 1,2-ジメトキシエタン
4. 1,2-ブチレンオキシド
5. 1,3-ジオキサラン
6. 2,3-ブチレンオキサイド
7. 2,3-ベンゾフラン
8. 2,5-ジメチルテトラヒドロフラン
9. 2,5-ジメチルフラン
10. 2-メチル-1,3-ジオキサラン
11. 2-メチルフラン
12. 2-メチルベンゾフラン
13. 3,3'-ジメトキシビフェニル
14. 4,4'-ジメトキシビフェニル
15. n-ブチルエーテル
16. n-ブチルエチルエーテル
17. n-プロピルエーテル
18. s-トリオキサン
19. tert-アミルエチルエーテル
20. tert-ブチルエチルエーテル
21. tert-ブチルメチルエーテル
22. アクロレインアセタール
23. アセタール
24. アニソール
25. エチラール
26. エチルイソプロピルエーテル
27. エチルビニルエーテル
28. エチレングリコールモノ-n-ブチルエーテル
29. エチレングリコールモノ-n-ブチルエーテルアセタート
30. エチレングリコールモノ-n-プロピルエーテル
31. エチレングリコールモノビニルエーテル

32. エチレングリコールモノプロピルエーテル
33. エチレングリコールモノヘキシルエーテル
34. エチレングリコールモノイソブチルエーテル
35. グアヤコールグリセロールエーテル
36. ジイソプロピルエーテル
37. ジエチレングリコールジエチルエーテル
38. ジエチレングリコールモノイソブチルエーテル
39. ジエチレングリコールモノエチルエーテル(カルビトール)
40. ジエチレングリコールモノヘキシルエーテル
41. ジエチレングリコールモノメチルエーテル
42. ジベンジルエーテル(ベンジルエーテル)
43. ジメチルオキシビフェニル
44. セバシン酸ビス(2-エチルヘキシル)
45. デカブロムゾフェニルエーテル
46. トリエチレングリコールモノ-n-ブチルエーテル
47. トリエチレングリコールモノエチルエーテル
48. トリエチレングリコールモノブチルエーテル
49. トリエチレングリコールモノメチルエーテル
50. トリプロピレングリコールモノメチルエーテル
51. ビス[2-(2-メトキシエトキシ)エチル]エーテル(テトラエチレングリコールジメチルエーテル)
52. ブチルカルビトールアセタート(酢酸ジエチレングリコールモノブチルエーテル)
53. プロピオンアルデヒドジエチルアセタール
54. ヘプタエチレングリコールモノドデシルエーテル(ヘプタオキシエチレンドデシルエーテル)
55. モノステアリン酸エチレングリコール

熱重量-示差熱分析

化学品(有機物)

DL-リンゴ酸
L-メントール
L(+)-アスコルビン酸
アニリンブラック
カフェイン(無水)
カフェイン-水和物
グラファイト
シリコンオイル
ステアリン酸カルシウム
ステアリン酸メチル
バニリン
フェノールフタレイン
活性炭

無機物

アルミニウム
ステンレス鋼
ソーダ石灰 1 号(ソーダライム)
リン酸-水素アンモニウム
リン酸水素ニアンモニウム
リン酸二水素アンモニウム
亜鉛
塩化アルミニウム
塩化アンモニウム
塩化鉛(Ⅱ)
過マンガン酸カリウム
銀
酸化カリウム
酸化マグネシウム(重質)
臭化テトラエチルアンモニウム
硝酸アンモニウム
硝酸銀

酢酸アンモニウム

酢酸ナトリウム

鉄

銅

硫酸第一鉄

硫酸銅

糖類

1,6-アンヒドロ- β -D-グルコフィラノース
D(-)-アラビノース
D(-)-ソルビトール(ソルビット)
D(-)-フルクトース(レブロース)(果糖)
D(-)-マンニトール(マンニット)
D(+)-ガラクトース
D(+)-キシロース
D(+)-グルコース[ぶどう糖(無水)]
D(+)-サッカロース(スクロース)
D(+)-マルトース-水和物(麦芽糖)
D(+)-マンノース
Meso-エリトリール
カードラン(β -1,3-グルカン)
キシリトール
ラクチトール-水和物
ラクトース-水和物(乳糖)

たんぱく質・アミノ酸

2,6-ジアミノピメリン酸
L(-)-トレオニン(L-スレオニン)
L(-)-プロリン
L(+)-アルギニン
L(+)-イソロイシン
L(+)-グルタミン(L-グルタミン)
L(+)-ノルロイシン

L(+)-リシン(L-リシン)
L-アスパラギン-水和物
L-アスパラギン酸
L-アラニン
L-グルタミン酸
L-システイン
L-セリン
L-チロシン
L-トリプトファン
L-バリン
L-ヒスチジン
L-ヒドロキシプロリン
L-フェニルアラニン
L-メチオニン
L-ロイシン
グリシン(アミノ酢酸)

プラスチック・ゴム・繊維など

アクリロニトリルブタジエンスチレン共
重合体(ABS)
ニトリル手袋(青)
フッ素ゴム(黒)
ポリアクリル酸
ポリメチルメタクリレート
ポリ塩化ビニル

食品

ゴマ油
サラダ油(菜種, キャノーラ)
牛乳

紫外線吸収スペクトル分析

2012 年度はなし

2012 年度はなし

[X線回折分析](#)

[硫酸塩](#)

アミド硫酸
チオ硫酸ナトリウム五水和物
テトラデシル硫酸ナトリウム
ピロ亜硫酸ナトリウム
ヘキサデシル硫酸ナトリウム
ペルオキシニ硫酸アンモニウム
ペルオキシニ硫酸カリウム
亜硫酸ナトリウム
亜硫酸ナトリウム七水和物
亜硫酸亜鉛
亜硫酸水素ナトリウム
二亜硫酸カリウム(ピロ亜硫酸カリウム)
二硫酸カリウム(ピロ硫酸カリウム)
二硫酸ナトリウム(ピロ硫酸ナトリウム)
硫酸アルミニウム(無水)
硫酸アルミニウム 14~18 水
硫酸アルミニウム 16~18 水
硫酸アルミニウムカリウム
硫酸アンモニウム
硫酸アンモニウム鉄・12 水
硫酸カリウム
硫酸ナトリウム(無水)
硫酸ヒドラジニウム(硫酸ヒドラジン)
硫酸マグネシウム(無水)
硫酸マグネシウム七水和物
硫酸亜鉛(無水)
硫酸亜鉛七水和物
硫酸水素カリウム
硫酸水素ナトリウム一水和物
硫酸第一鉄アンモニウム(モール塩)
硫酸第二鉄アンモニウム・12 水
硫酸第二セリウムアンモニウム二水和物
硫酸第二鉄
硫酸鉄(II)アンモニウム六水和物
硫酸鉄(II)七水和物
硫酸銅(II)(無水)
硫酸銅(II)五水和物

[炭酸塩\(炭酸水素塩\)](#)

塩基性炭酸亜鉛
炭酸カリウム
炭酸ナトリウム(無水)
炭酸ナトリウムカリウム
炭酸リチウム
炭酸亜鉛

炭酸水酸化亜鉛
炭酸水素カリウム(重炭酸カリウム)
炭酸水素ナトリウム(重炭酸ナトリウム)

[酢酸塩\(エタン酸塩\)](#)

四酢酸鉛
酢酸カルシウム一水和物
酢酸ナトリウム(無水)
酢酸ナトリウム三水和物
酢酸亜鉛七水和物
酢酸亜鉛二水和物
酢酸鉛(II)三水和物
酢酸第二水銀

[硝酸塩](#)

亜硝酸ナトリウム
硝酸カリウム
硝酸コバルト(II)六水和物
硝酸マグネシウム
硝酸鉛(II)
硝酸銀

[臭素酸塩](#)

臭化カリウム
臭化ナトリウム
臭化水銀(II)
臭素酸カリウム

[塩素酸塩](#)

亜塩素酸ナトリウム
塩素酸カリウム
過塩素酸ナトリウム(無水)
過塩素酸ナトリウム一水和物
過塩素酸バリウム
過塩素酸マグネシウム
高度さらし粉[Ca(ClO)₂・3H₂O]

[リン酸塩](#)

12 モリブト(IV) リン酸 n 水和物(リンモリブテン酸)
ホスホン酸(亜リン酸)
リントングステン酸ナトリウム n 水和物
リン酸一水素カルシウム
リン酸三ナトリウム・12 水
リン酸水素ニアンモニウム
リン酸水素ナトリウム
リン酸水素二ナトリウム(無水)

リン酸二水素カリウム
リン酸二水素カルシウム
リン酸二水素ナトリウム(無水)
リン酸二水素ナトリウム二水和物
五酸化リン
酸化リン(V)(五酸化ニリン)

[ヨウ素酸塩](#)

ヨウ化カリウム
ヨウ化ナトリウム
ヨウ素酸カリウム
過ヨウ素酸カリウム
過ヨウ素酸ナトリウム

[モリブデン酸塩](#)

モリブデン酸アンモニウム

[ホウ酸塩](#)

ホウ酸
ホウ酸ナトリウム(無水)
四ホウ酸ナトリウム(無水)
四ホウ酸ナトリウム十水和物(ホウ砂)

[フッ化水素酸塩](#)

フッ化アンモニウム(中性)
フッ化ナトリウム

[バナジン酸塩](#)

バナジン酸アンモニウム

[チオシアン酸塩](#)

チオシアン酸アンモニウム
チオシアン酸カリウム

[スルファミン酸塩](#)

スルファミン酸アンモニウム

[ケイ酸塩](#)

カオリン
ケイ酸ナトリウム
ケイ酸マグネシウム
二酸化ケイ素(石英型)

[クロム酸塩](#)

クロム酸カリウム
酸化クロム(IV)(無水クロム酸)
重クロム酸カリウム

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，付録として今年度は下表に示す3つのテーマで資料を作成した。

年度	付録 No.	テーマ	内容
2012	付録 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。
	付録 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。
	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)	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。
	付録 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。
	付録 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。
2013	付録 6	フッ素樹脂の熱分解クロマトグラフィー	PTFE とフッ素樹脂の共重合体である PFA を入手し，熱分解クロマトグラムの違い及び生成フラグメントについて解析した。
	付録 7	アミノ酸の IR スペクトルの比較	アミノ酸の IR スペクトルの特徴及びそれらの僅かな違いを示す。
	付録 8	糖類の構造と赤外線吸収スペクトル	単糖，二糖類及び糖アルコールの赤外線吸収スペクトルの違いについて考察する

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。
- 3000cm^{-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 (720cm^{-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 3000cm^{-1} , 900cm^{-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)

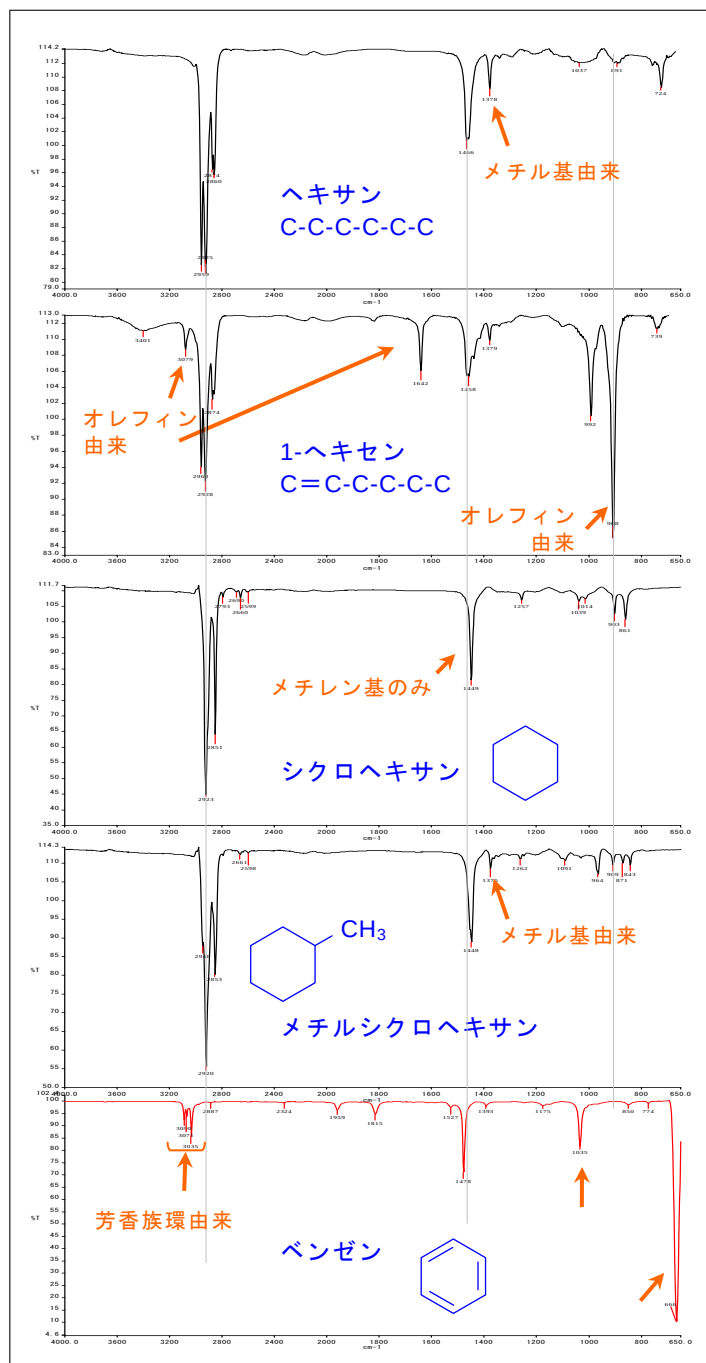
最もシンプルな構造のメチレン基だけで構成されるため、スペクトルもシンプルである。

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。

- 1110cm^{-1} 付近にエーテル ($-\text{C}-\text{O}-\text{C}-$) 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 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。

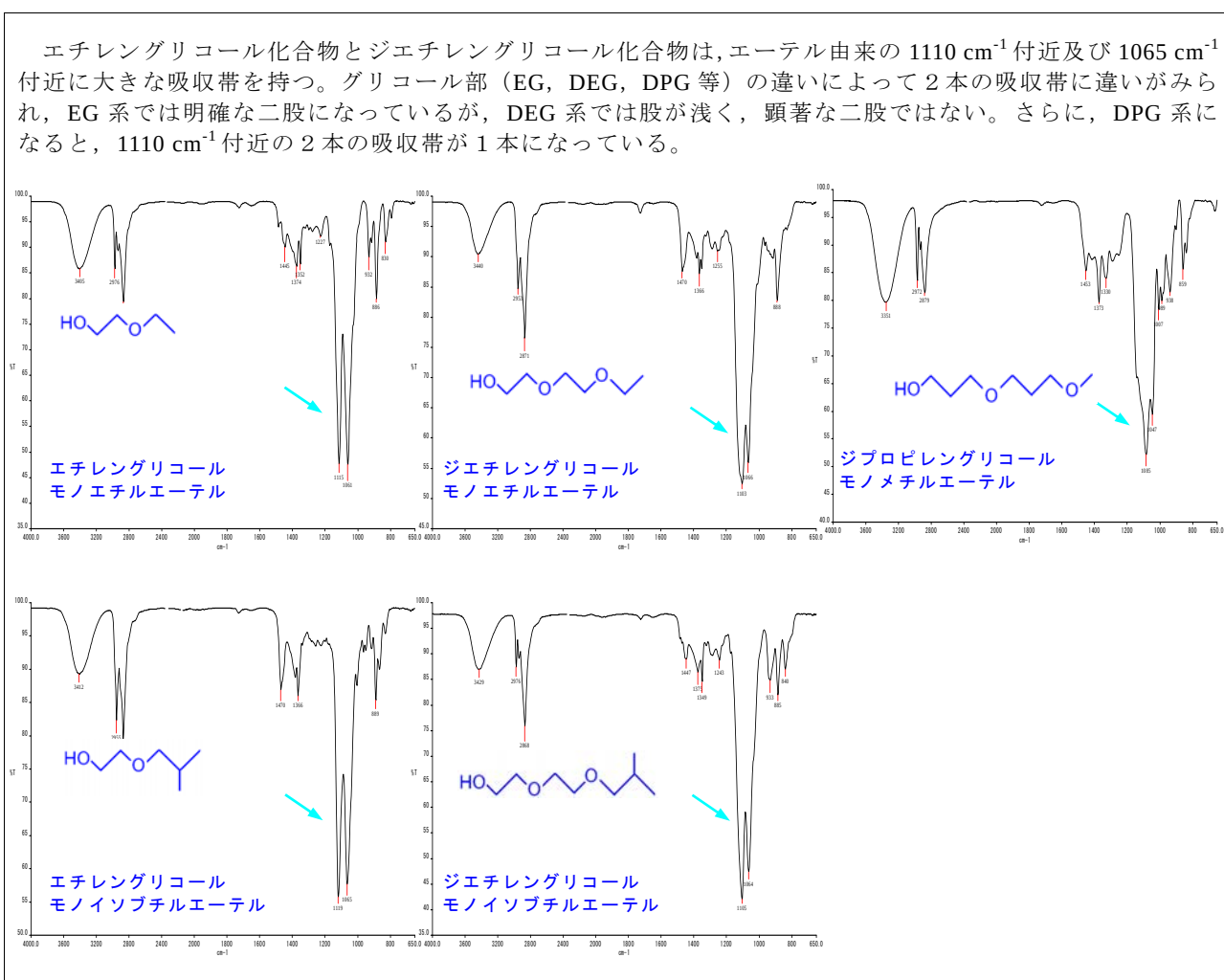
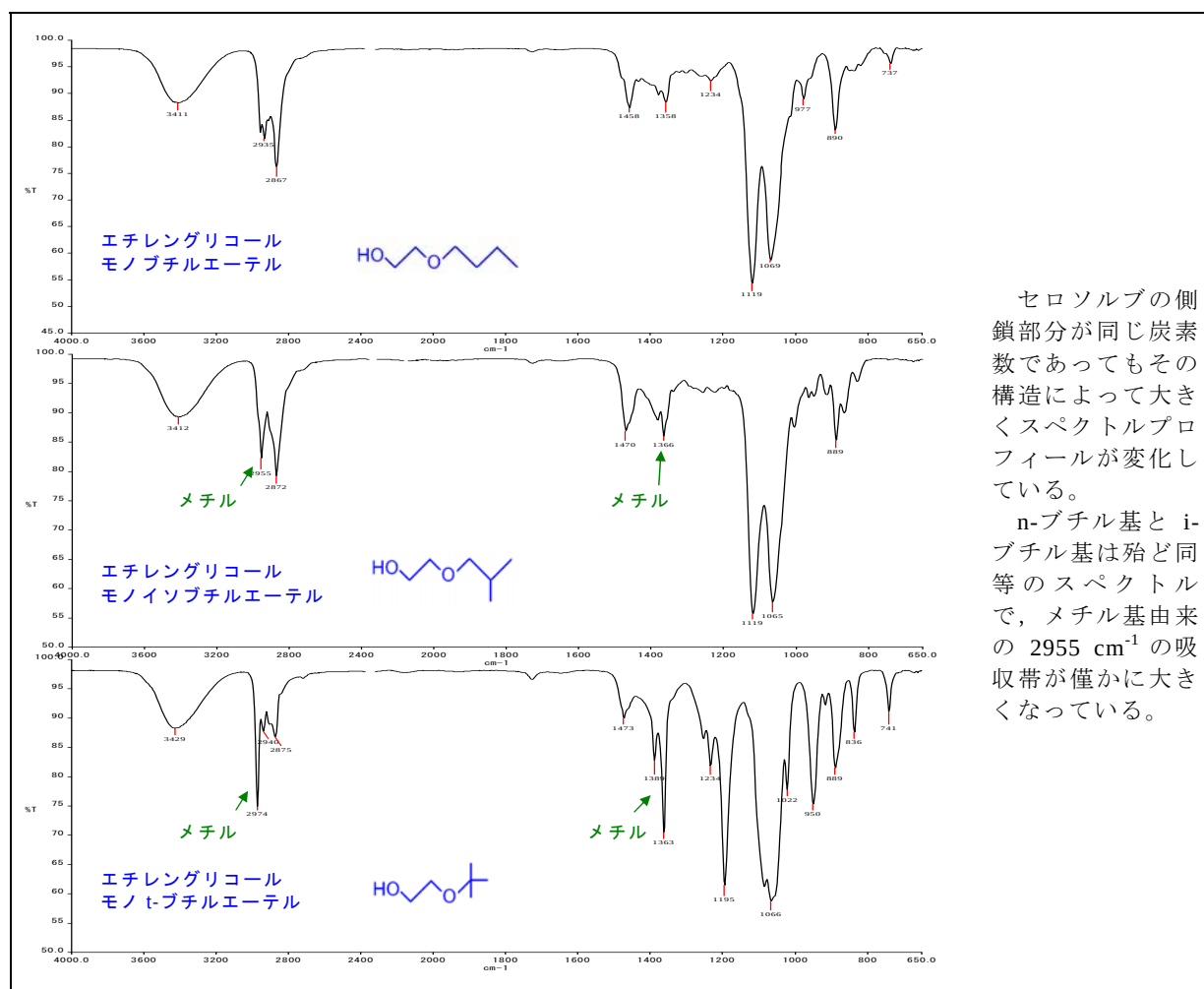


図1 グリコール化合物の特性吸収帯 1110 cm^{-1} 付近



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ィールが変化している。

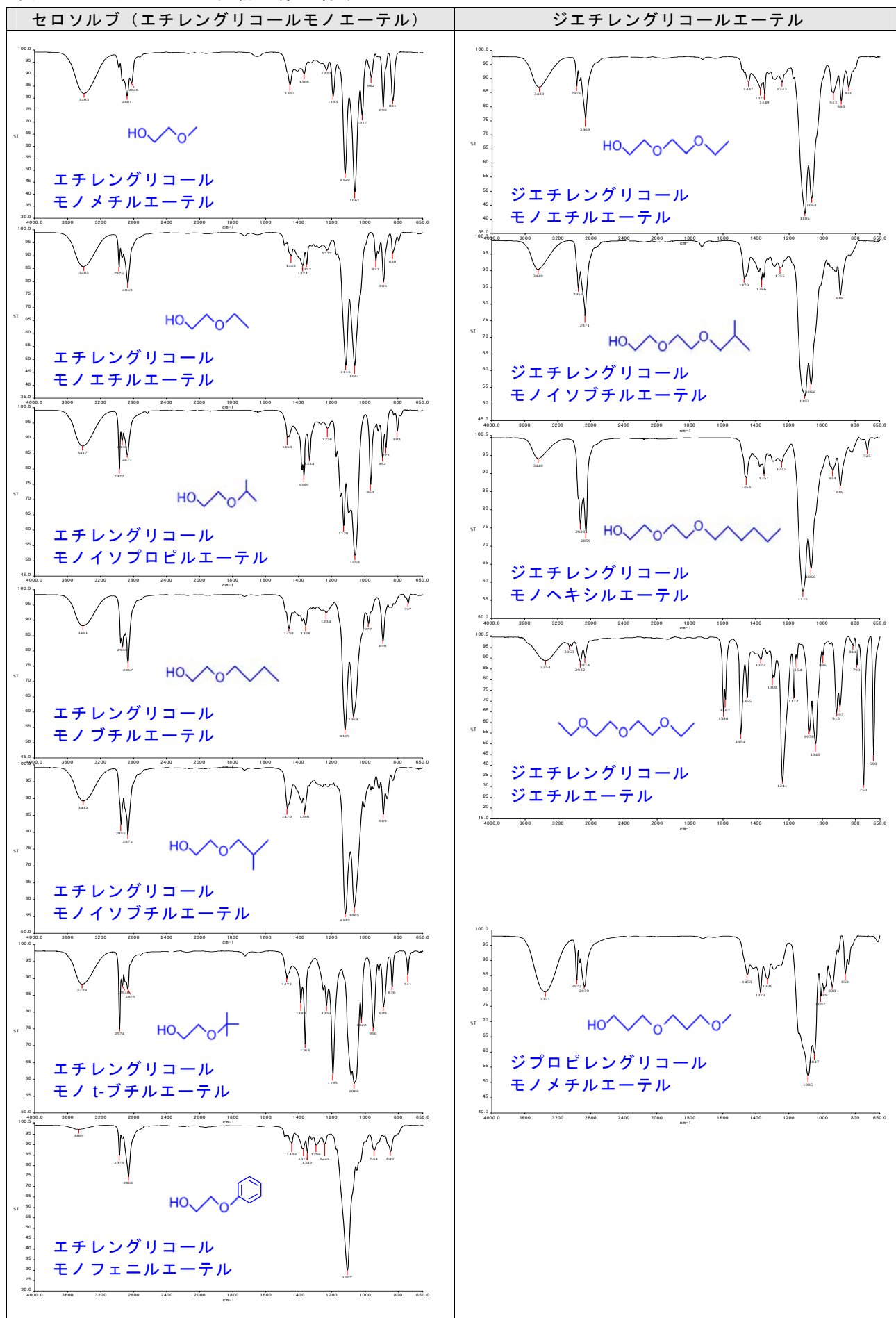
n-ブチル基と i-ブチル基は殆ど同等のスペクトルで、メチル基由来の 2955 cm^{-1} の吸収帯が僅かに大きくなっている。

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^{-1}
- エーテル基由来 (C-O-C) …… 1150 cm^{-1} 付近
- アルキル基由来 ($\text{-CCC}\cdots$) …… 2900 cm^{-1} 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 3010 cm^{-1} の吸収が大きくなる。
- アルキル基由来の 2900 cm^{-1} とエステル基由来の 1740 cm^{-1} 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^{-1} 付近の吸収の大きさ（ 1740 cm^{-1} 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。

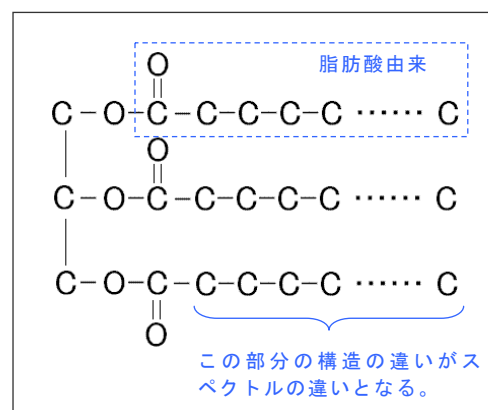


図1 油脂の分子構造

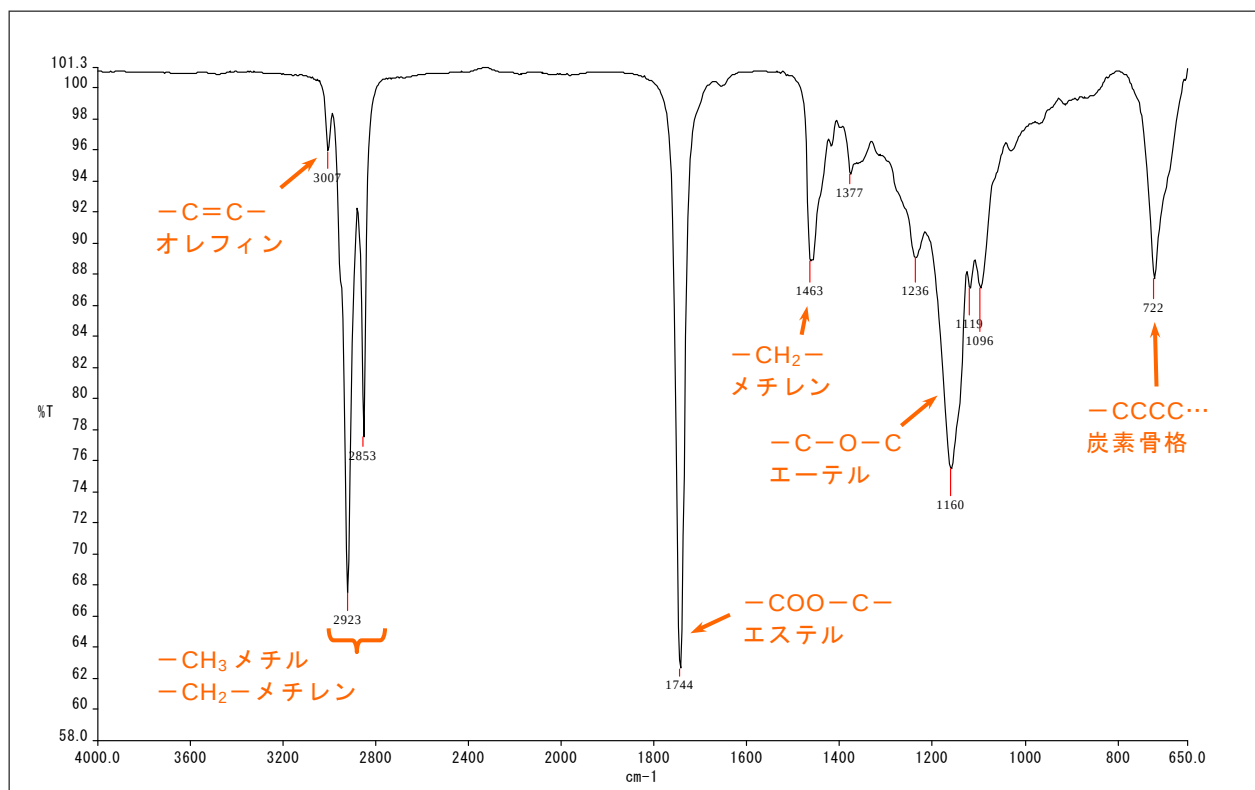


図2 油脂の代表的なスペクトル（ナタネ油）

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			炭化水素由来の2900cm ⁻¹ 付近の吸収とエステル由来の1744cm ⁻¹ の吸収はほぼ同じ高さである。
ラード			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。
マーガリン			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。
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		(データなし)	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。
バター			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。

表 2-1 液状油脂

試料	赤外線吸収スペクトル	脂肪酸組成
ナタネ油		
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		
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		
コーン油		

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		
亜麻仁油		
エキストラバージンセサミオイル		(データなし)
マカダミアナッツオイル		
アーモンド油		

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		(データなし)
ジョジョバシードオイル		(データなし)

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ァイル（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ァイルである。

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
パイロホイル	F590（鉄／コバルト／ニッケル合金）
試料量	5mg（混繊維は1：1で混合）
GC-MS 分析条件	
カラム	DB-5MS（30m×0.25mmφ, 膜厚1.0μm）
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ァイルだけでは判別し難い。

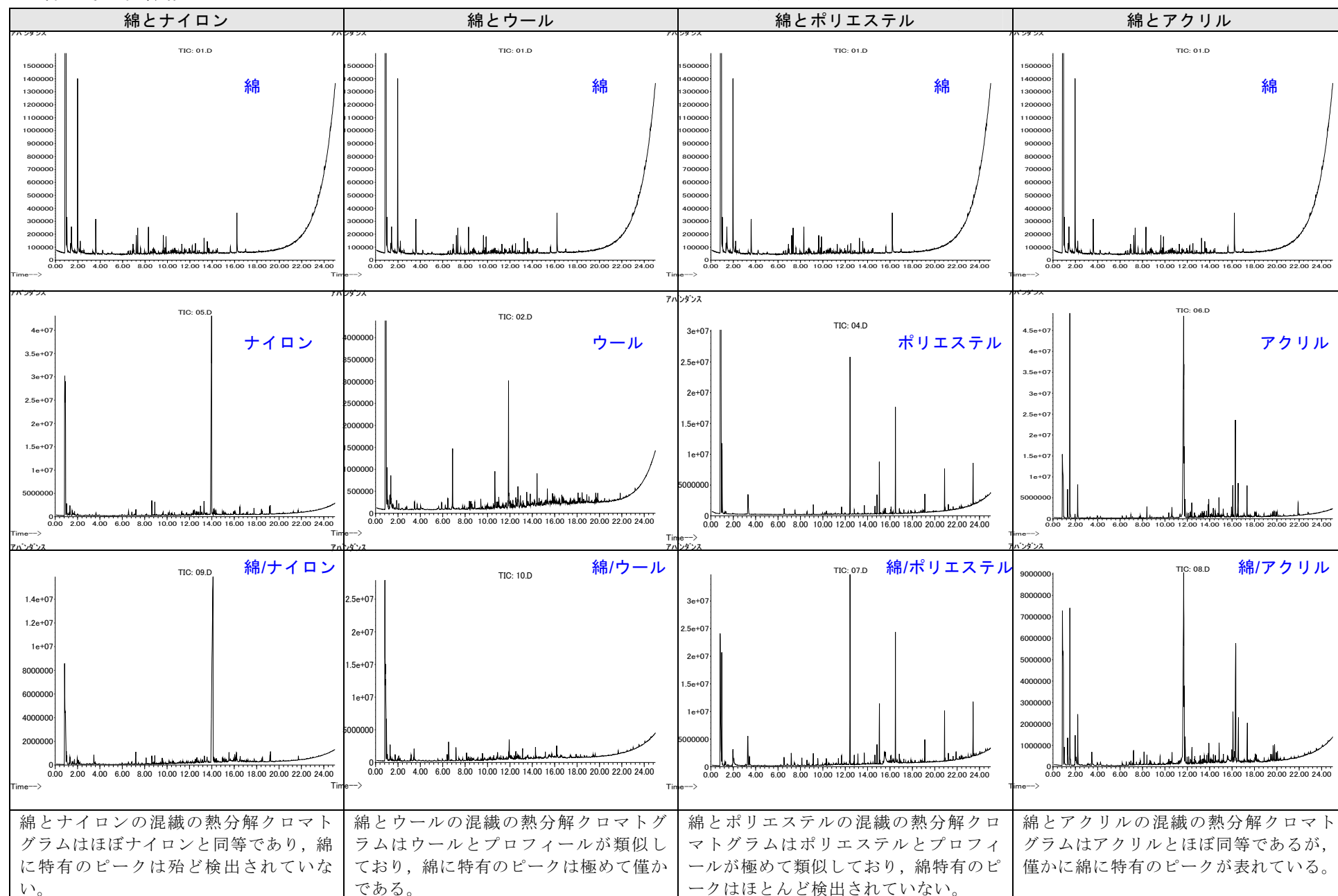


表4 ポリエステルとその他繊維

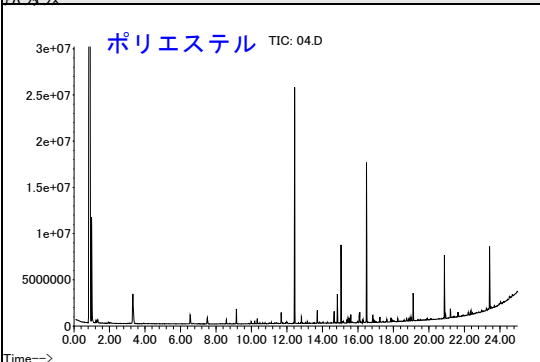
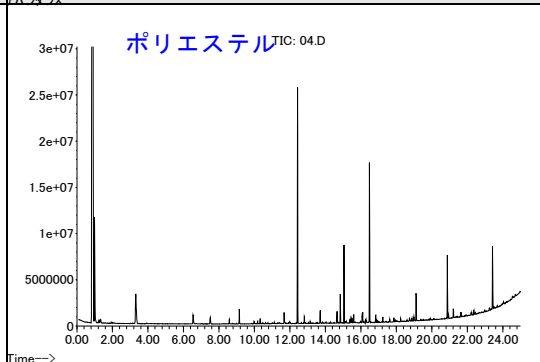
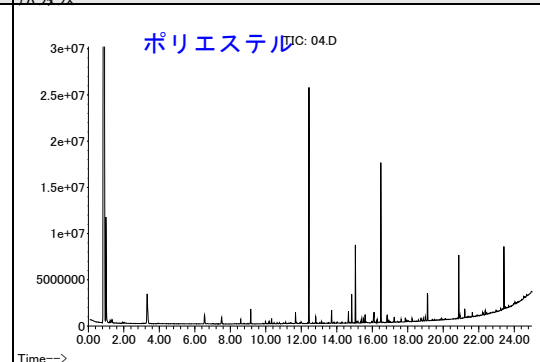
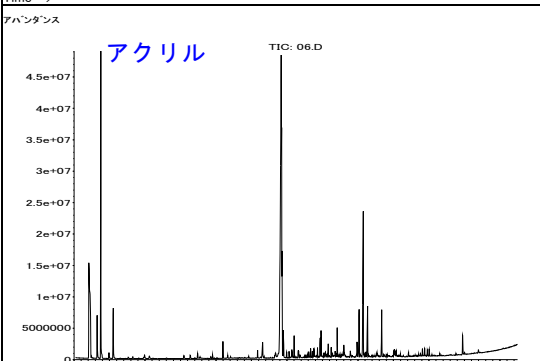
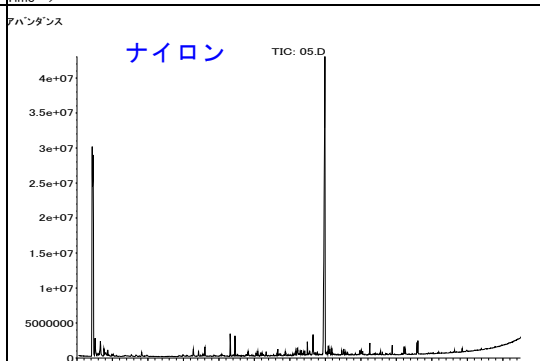
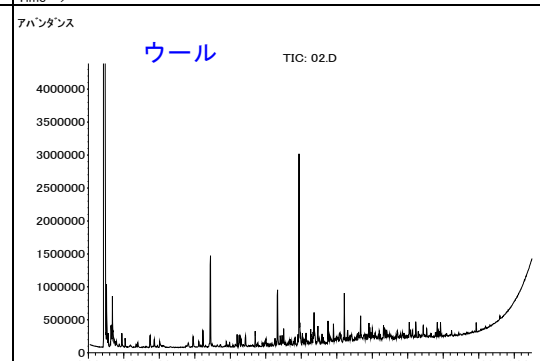
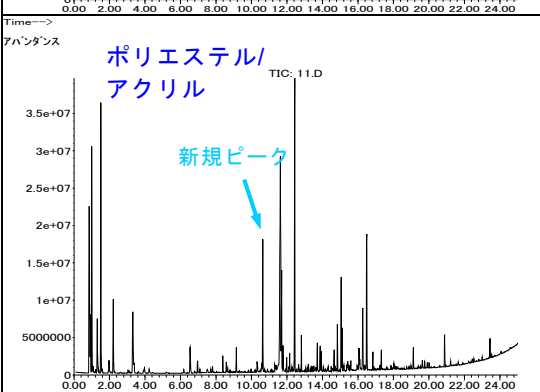
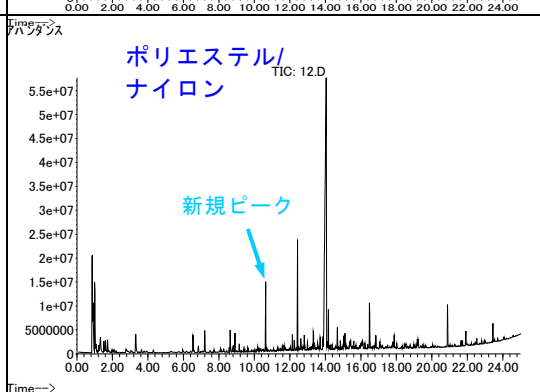
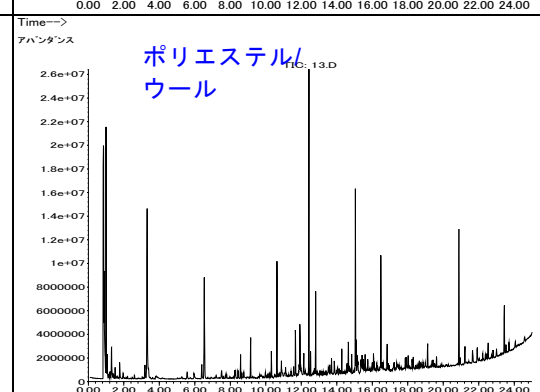
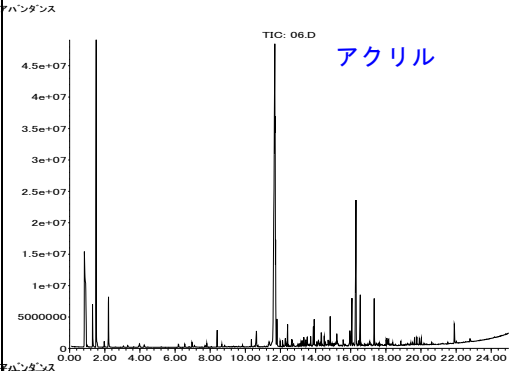
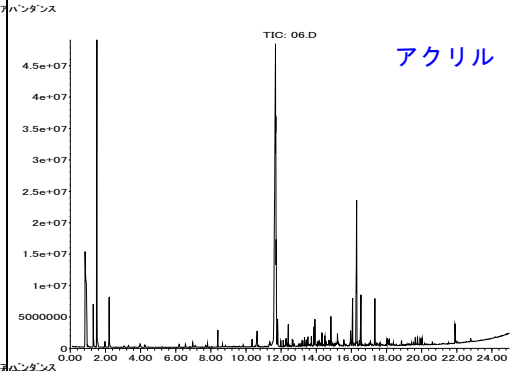
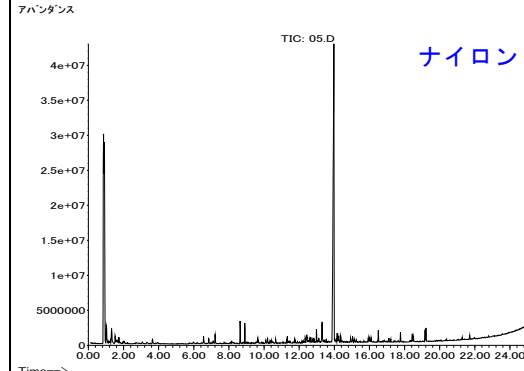
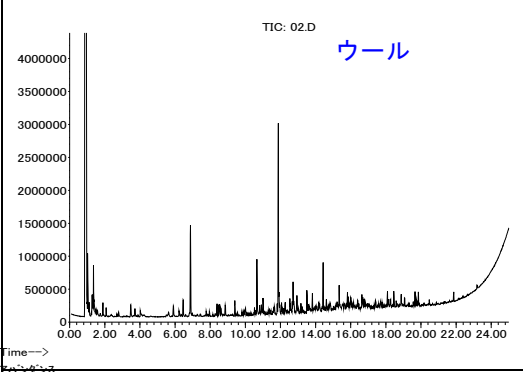
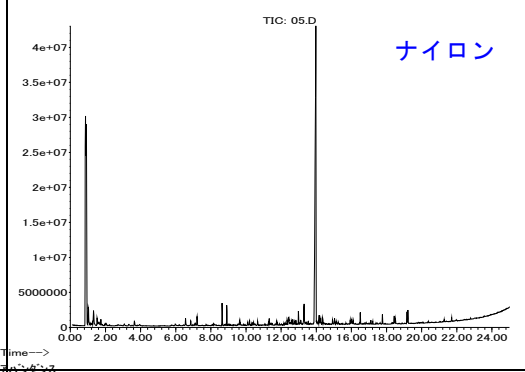
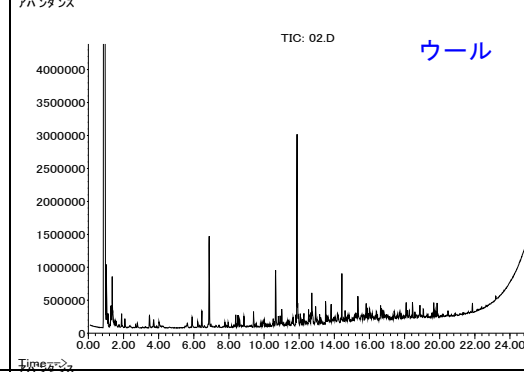
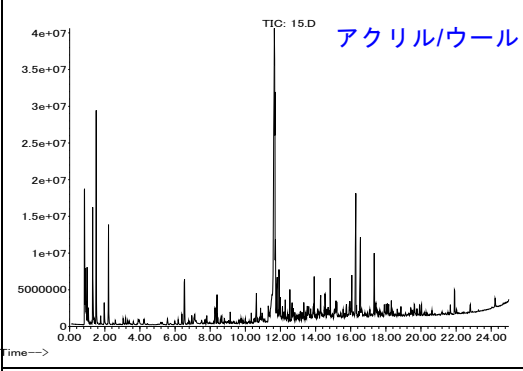
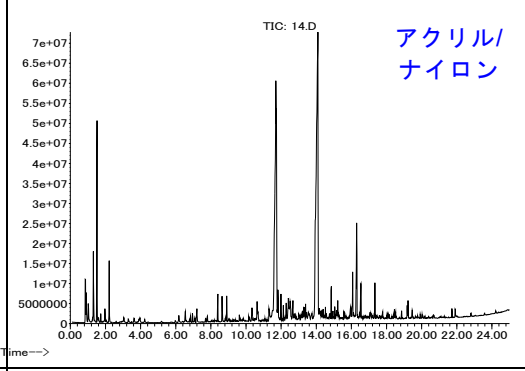
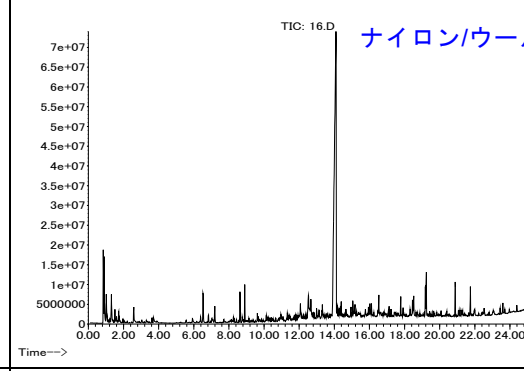
ポリエステルとアクリル	ポリエステルとナイロン	ポリエステルとウール	
ポリエステル TIC: 04.D 	ポリエステル TIC: 04.D 	ポリエステル TIC: 04.D 	
アクリル TIC: 06.D 	ナイロン TIC: 05.D 	ウール TIC: 02.D 	
ポリエステル/アクリル TIC: 11.D 新規ピーク 	ポリエステル/ナイロン TIC: 12.D 新規ピーク 	ポリエステル/ウール TIC: 13.D 	ポリエステルと化学繊維の混織の熱分解ガスクロマトグラムは、両試料のクロマトグラムが混ざった形で見出されたが、単体では見られなかった新しい物質ピークが見出された。ただし、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。
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。	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。	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。	

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	
			
			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。
			
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。	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。	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。	

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 (プロファイル) 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。

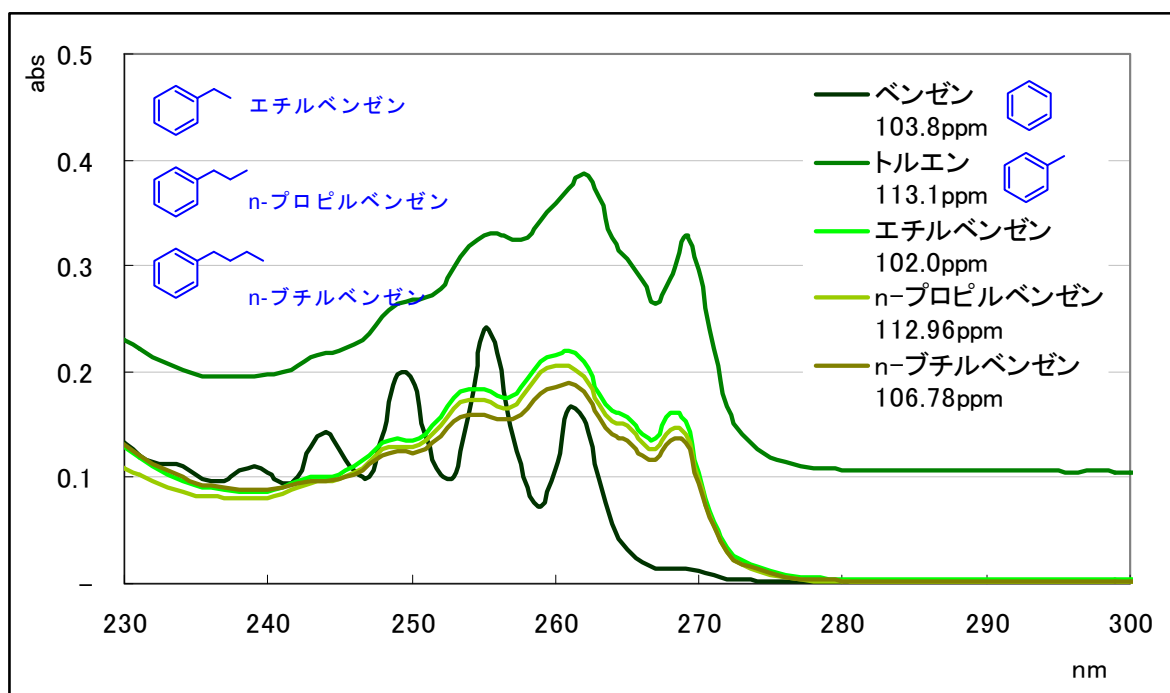


図 1 直鎖炭化水素置換基

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。

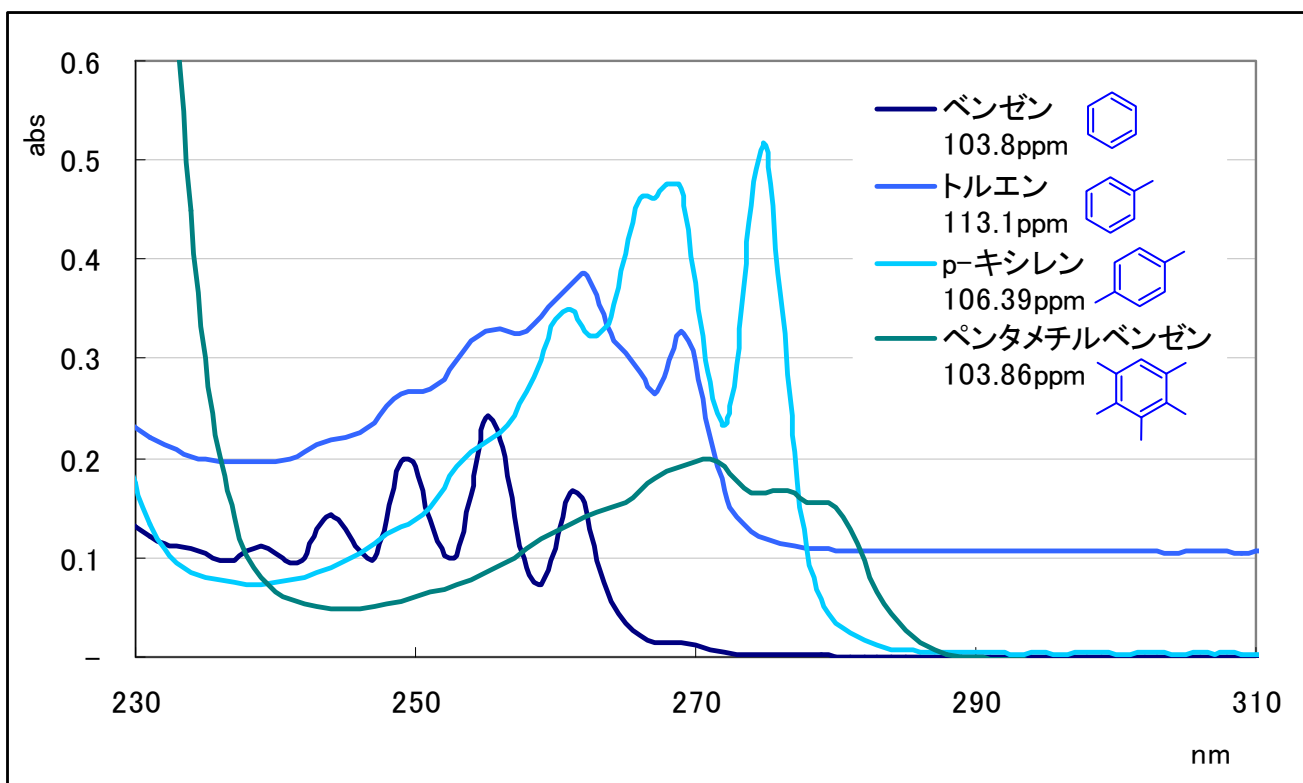


図2 置換基の数の違い

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。

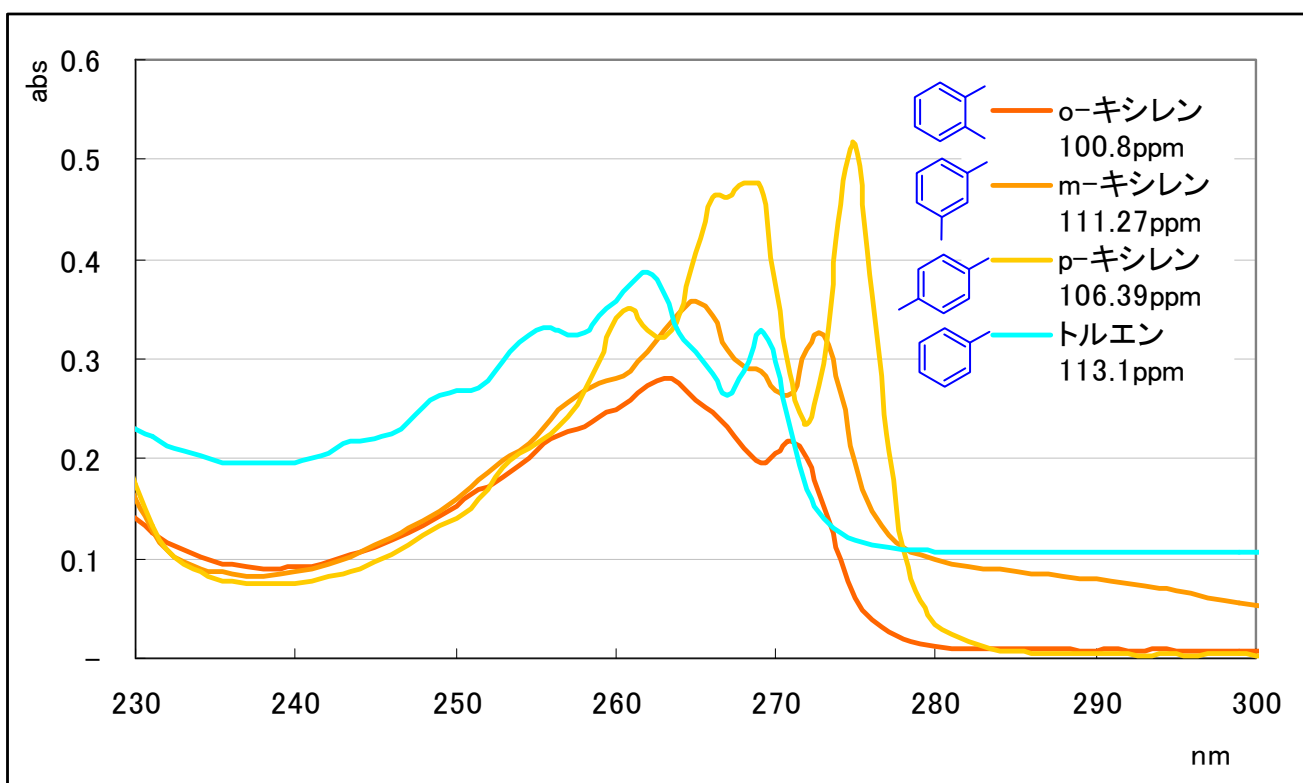


図3 トルエンとキシレン（配位の違い）

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、パラの順に長波長側へ吸収ピークがシフトしている。

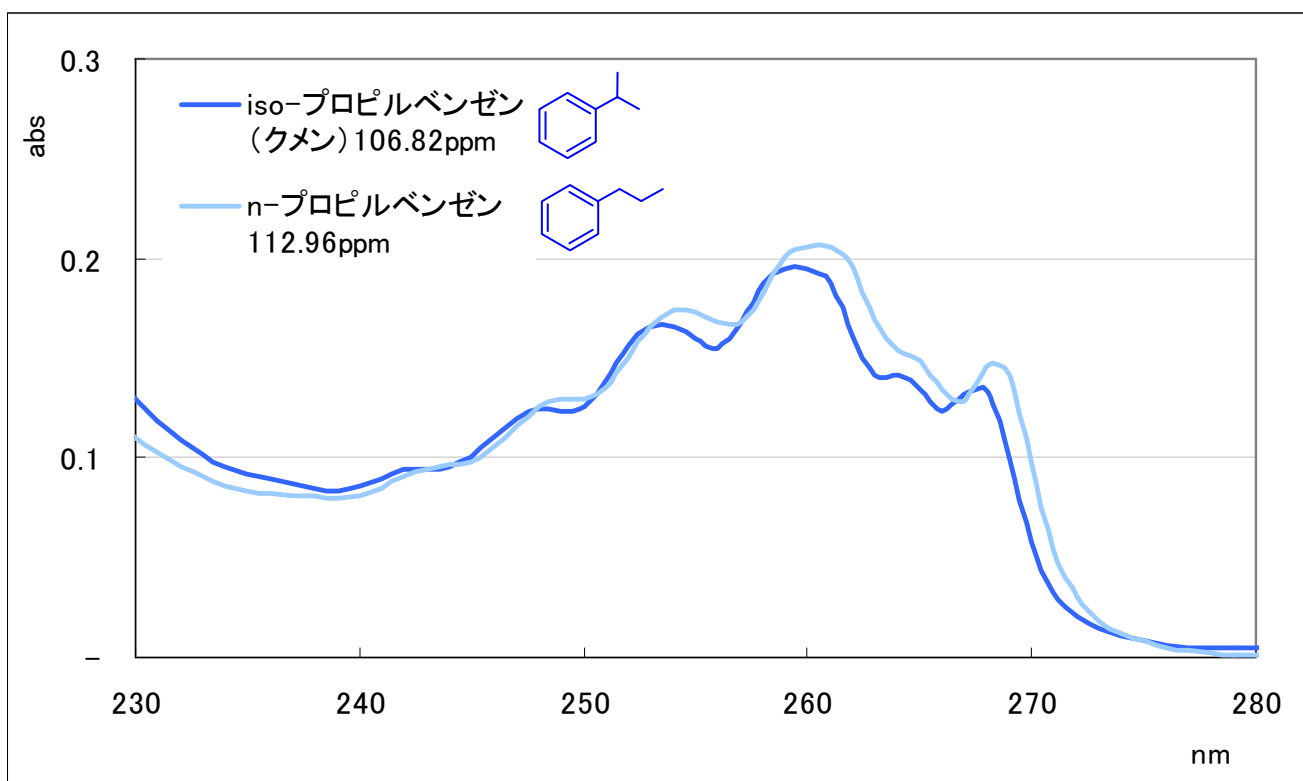


図4 直鎖型と分岐型

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。

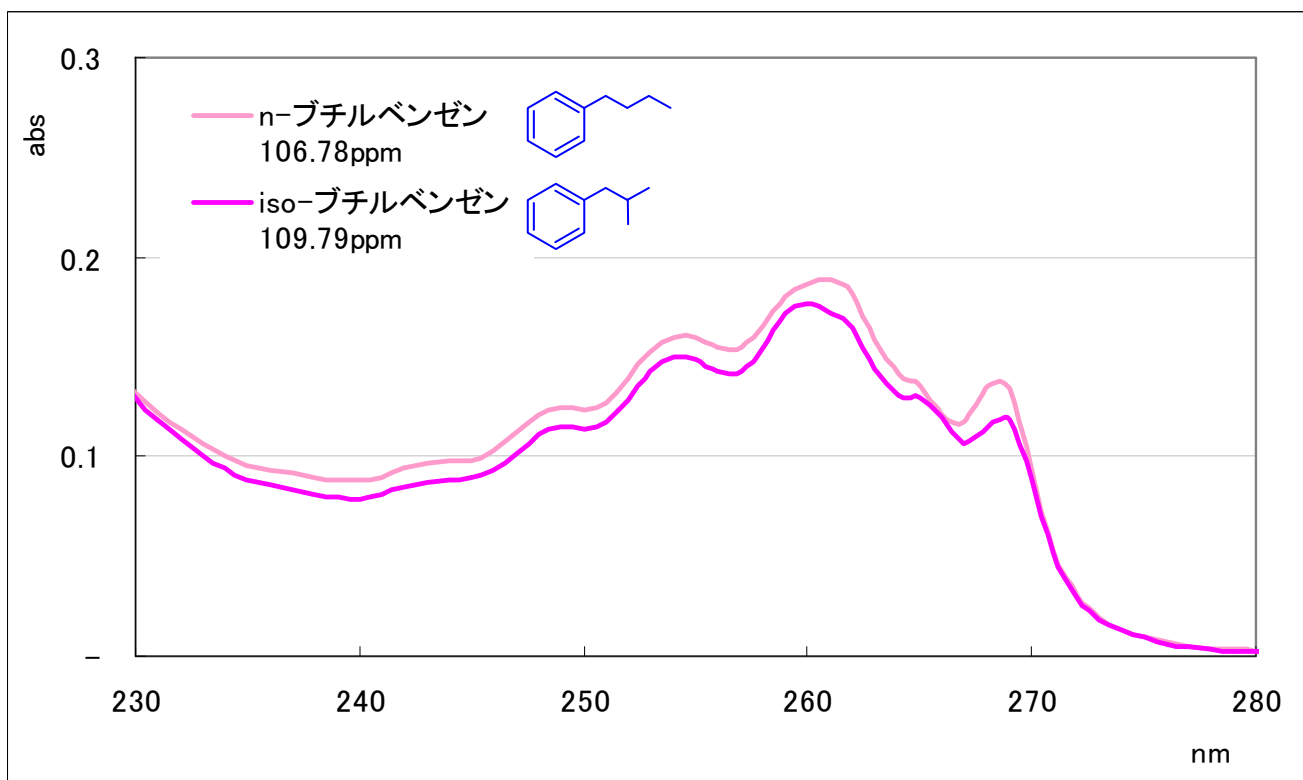


図5 直鎖型と分岐型

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。

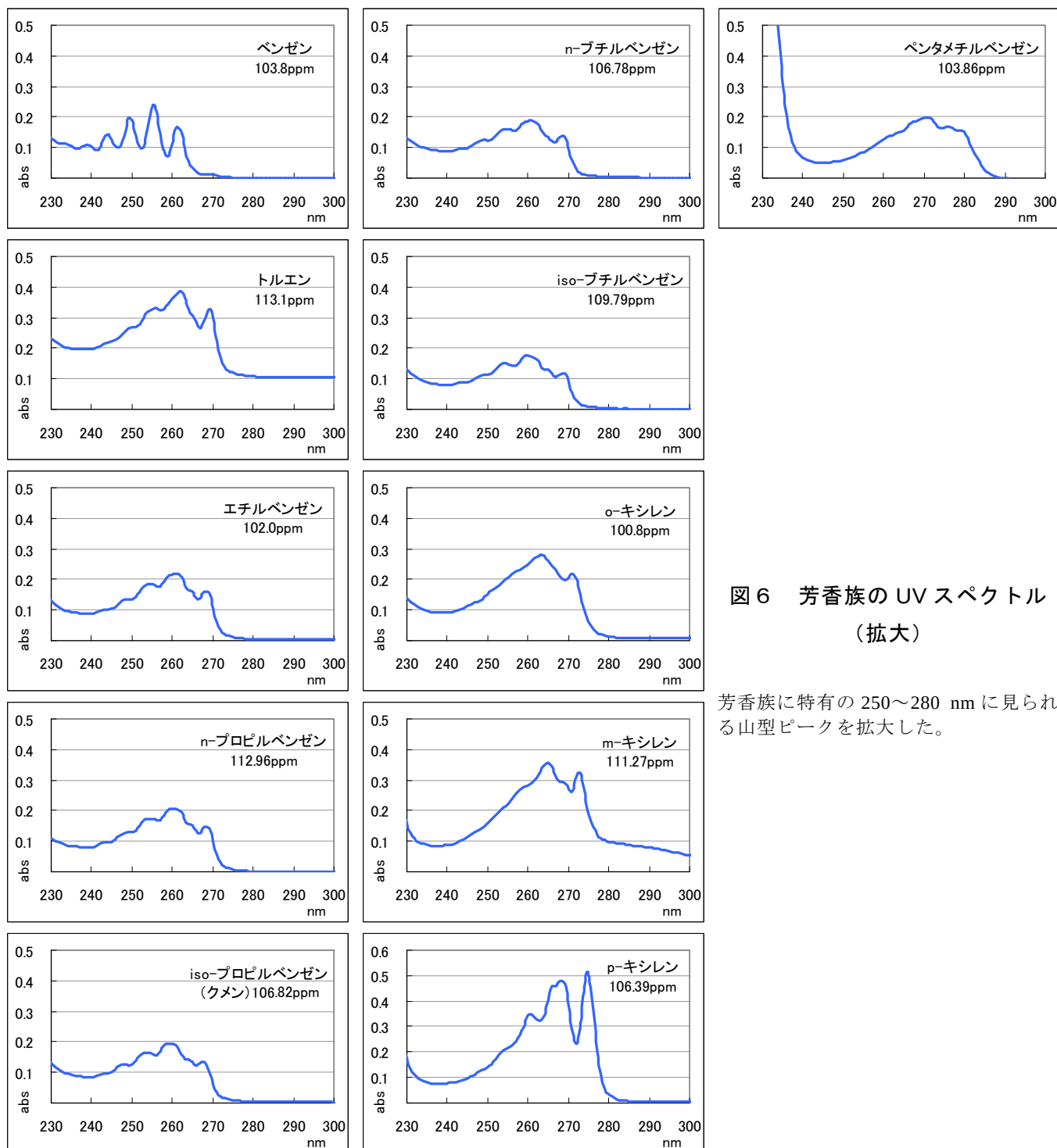


図6 芳香族の UV スペクトル
(拡大)

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。

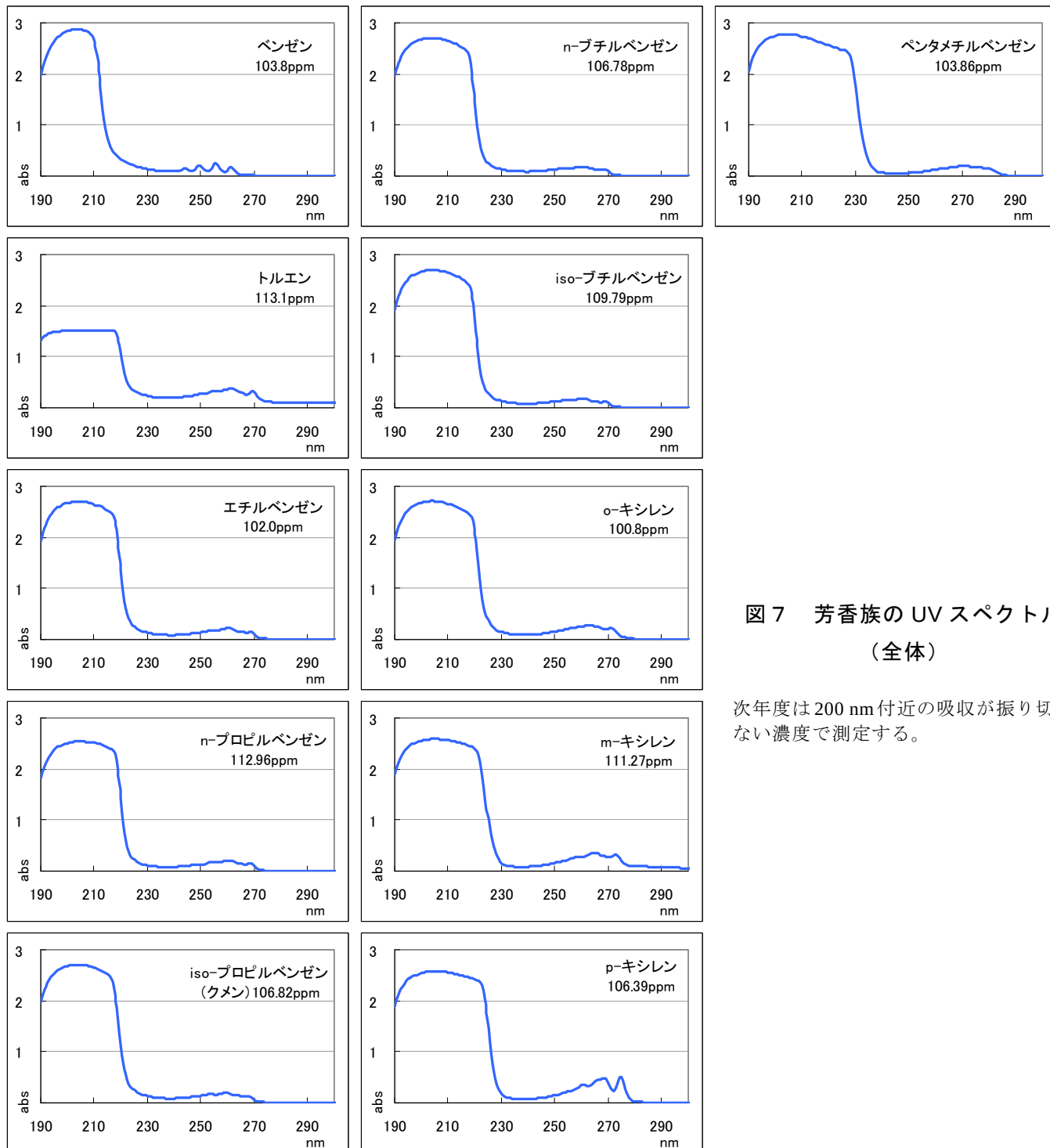


図7 芳香族のUVスペクトル
(全体)

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。

フッ素樹脂の熱分解クロマトグラフィー

フッ素樹脂には以下の種類があるが、中でも最も多く生産されているのはポリテトラフルオロエチレン (PTFE) である。今回、PTFE とフッ素樹脂の共重合体である PFA を入手し、熱分解クロマトグラムの違い及び生成フラグメントについて解析した。

【フッ素樹脂の種類】

◆ 完全フッ素化樹脂

- ポリテトラフルオロエチレン (四フッ素化樹脂, PTFE)

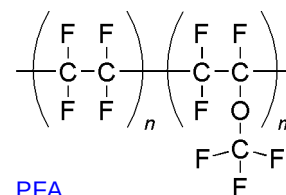
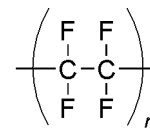
◆ 部分フッ素化樹脂

- ポリクロロトリフルオロエチレン (三フッ素化樹脂, PCTFE, CTFE)
- ポリフッ化ビニリデン (PVDF)
- ポリフッ化ビニル (PVF)

◆ フッ素化樹脂共重合体

- ペルフルオロアルコキシフッ素樹脂 (PFA)
- 四フッ化エチレン・六フッ化プロピレン共重合体 (FEP)
- エチレン・四フッ化エチレン共重合体 (ETFE)
- エチレン・クロロトリフルオロエチレン共重合体 (ECTFE)

PTFE



PFA

1. PTFE と PFA の熱分解クロマトグラフィー

590℃・5 秒で試料を熱分解してガスクロマトグラフ質量分析を行った。

PTFE は C₂F₄, C₃F₆ のピークが大きくでているが、PFA は C₃F₆ 以外に C₇F₁₆ のフラグメントも検出された。C₇F₁₆ は PTFE からは検出されていない。

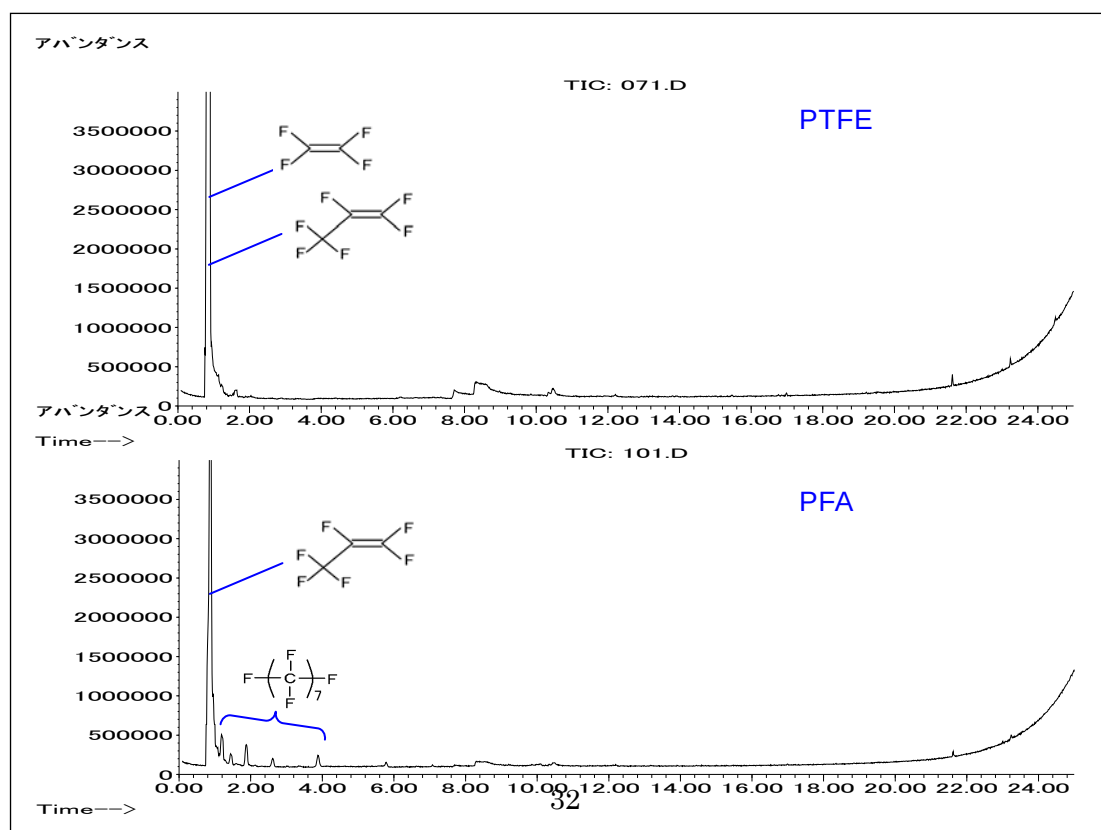


図1 PTFE と PFA の熱分解クロマトグラム

2. フッ素樹脂と接着剤の混合物

フッ素樹脂は接着が難しいと言われているが、これの接着剤としてポリエーテルサルフォンが使われていることがある。この2つを混合した状態で熱分解ガスクロマトグラフ質量分析を行った。なお、分析条件は前項と同じである。

- (1) PTFE とポリエーテルサルフォンの混合物を熱分解すると、主に SO_2 、 C_2F_4 、フェノール、ビフェニルエーテルが生成した。また、僅かに C_7F_{16} 等のフッ素樹脂フラグメントも見出された。
- (2) PFA とポリエーテルサルフォンの混合物を熱分解すると、主に SO_2 、 C_2F_4 、フェノール、ビフェニルエーテルが生成した。さらに、PFA のフラグメントであるエーテルが検出される可能性が考えられたがエーテルは検出されず、カルボン酸が検出された。すなわち、「 $\text{CF}_n\text{-O-CF}_n$ 」ではなく、「 $\text{CF}_n\text{CF}_n\text{-COOH}$ 」という形でフラグメントが生成した。

3. 課題

今後、他のフッ素樹脂についても標準を入手してクロマトグラム及び生成フラグメントの解析を実施する。

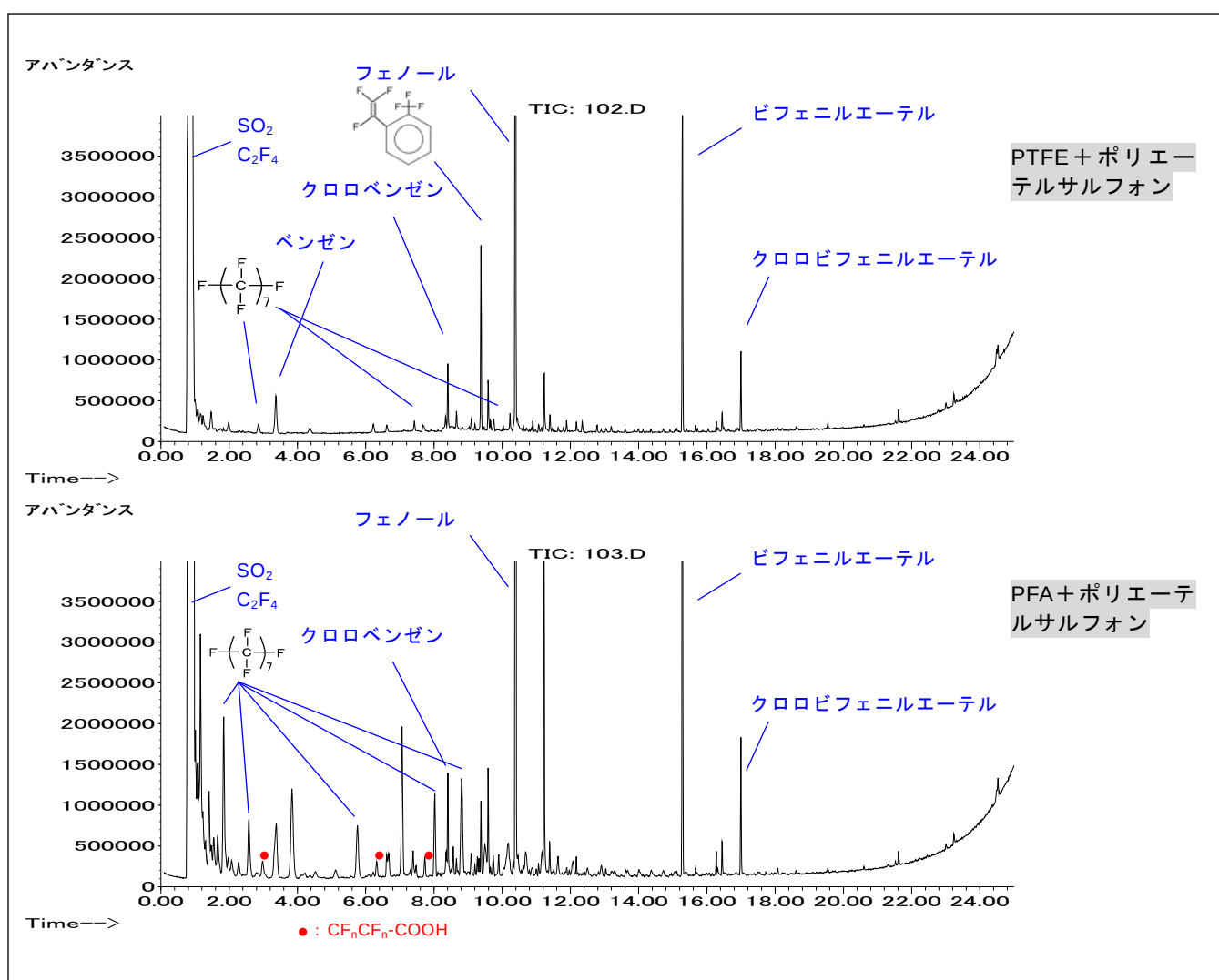


図2 フッ素樹脂とポリエーテルサルフォンの熱分解ガスクロマトグラム

アミノ酸の IR スペクトルの比較

タンパク質はアミノ酸のポリマーであり、タンパク質の赤外線吸収スペクトルはどれも似たようなプロフィールを示す(図1)。しかし、そのモノマーであるアミノ酸はそれぞれ構造・官能基が異なり、赤外線吸収スペクトルのプロフィールも異なるはずである。

自然界にはおよそ 500 種類ものアミノ酸が存在していると言われているが、そのうちヒトの体を構成し、生命の維持に必要とされるのが 20 種類のアミノ酸である。同じアミノ酸でもそれぞれの働きは異なり、いずれかが不足すると、体のどこかに変調を来してしまうという。ヒトの体内で合成できるアミノ酸を「非必須アミノ酸」、合成できないアミノ酸を「必須アミノ酸」という。今回、ヒトの生命維持に係ると言う 20 種のアミノ酸について赤外線吸収スペクトル分析を行った。

表1には、アミノ酸骨格の側鎖部分の化学構造を記載した。

アミノ酸の赤外線吸収スペクトル分析によって明らかとなった事項は以下の通りである。

- (1) アミノ酸の赤外線吸収スペクトルの特徴は、①水素結合による $3400\sim 2400\text{ cm}^{-1}$ 付近のブロードな吸収帯、② 1660 cm^{-1} 以下の多数のシャープな吸収帯である。
- (2) 1660 cm^{-1} 以下の吸収帯は、 1660 cm^{-1} 付近が最も吸収が大きく、低波数側になるにつれ吸収が小さくなる傾向がある。
- (3) アミノ酸の種類により赤外線吸収スペクトルが異なることから、種類の識別に役立つものと考えられる。

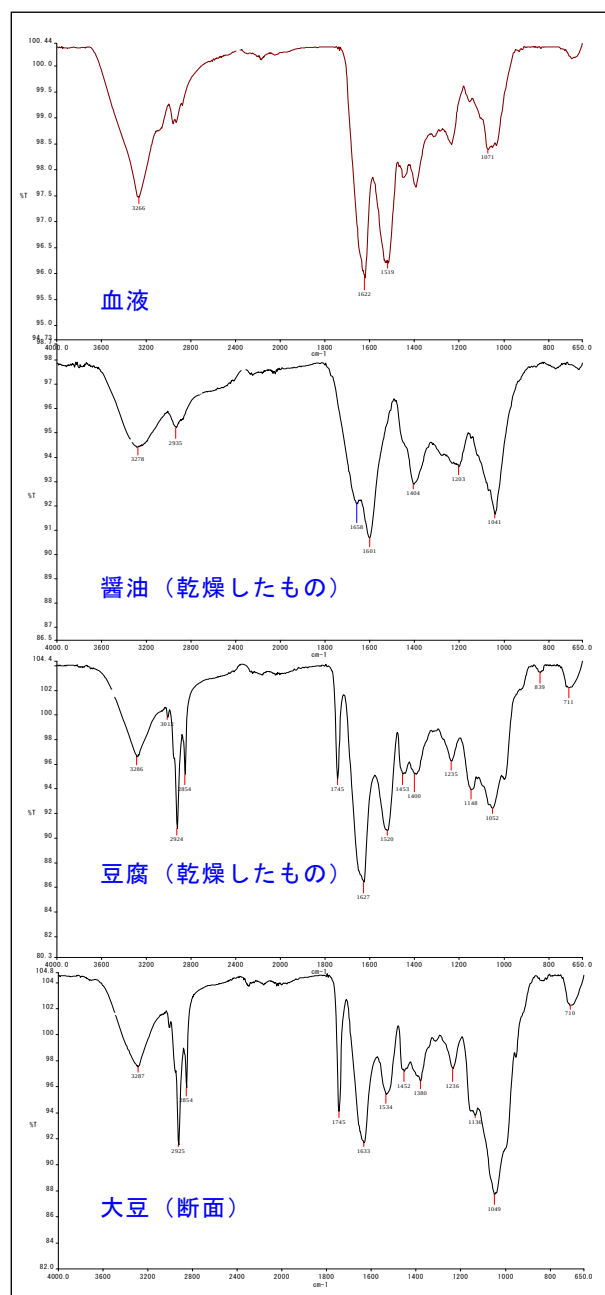


図1 タンパク質の赤外線吸収スペクトル

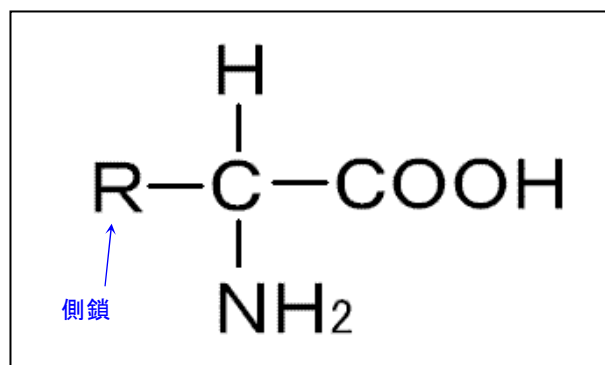


図2 アミノ酸の基本骨格

アミノ酸 20 種 側鎖構造による分類

親水性 アミノ酸	塩基性	 <chem>—CH2—CH2—CH2—CH2—NH3+</chem> リジン★	疎水性 アミノ酸	脂肪族	 <chem>—CH3</chem> アラニン
		 <chem>—CH2—CH2—CH2—NH—C(=NH2+)(NH2)—</chem> アルギニン			 <chem>—H</chem> グリシン
		 <chem>—CH2—C(=NH)(NH)—CH=NH</chem> ヒスチジン★			 <chem>—CH(CH3)2</chem> バリン★
	酸性	 <chem>—CH2—COO—</chem> アスパラギン酸		 <chem>—CH(CH3)—CH2—CH3</chem> イソロイシン★	
		 <chem>—CH2—CH2—COO—</chem> グルタミン酸		 <chem>—CH2—CH(CH3)2</chem> ロイシン★	
		 <chem>—CH2—OH</chem> セリン		 <chem>—CH2—C6H5</chem> フェニルアラニン★	
	中性	 <chem>—CH(OH)—CH3</chem> トレオニン★		芳香族	 <chem>—CH2—C6H4—OH</chem> チロシン
		 <chem>—CH2—C(=O)—NH2</chem> アスパラギン			 <chem>—CH2—C(=O)—NH—C6H4</chem> トリプトファン★
		 <chem>—CH2—CH2—C(=O)—NH2</chem> グルタミン			含硫黄
	★＝必須アミノ酸 (1) アミノ酸の赤外線吸収スペクトルの特徴は、①水素結合による 3400～2400 cm⁻¹ 付近のブロードな吸収帯、②1660 cm⁻¹ 以下の多数のシャープな吸収帯である。 (2) 1660 cm⁻¹ 以下の吸収帯は 1660 cm⁻¹ 付近が最も吸収が大きく、低波数側になるにつれ吸収が小さくなる傾向がある。 (3) アミノ酸の種類により赤外線吸収スペクトルが異なることから、種類の識別に役立つものと考えられる。	イミノ酸		 <chem>—CH2—CH2—NH—CH2—</chem> プロリン	
	特殊アミノ酸				

付録8

糖類の構造と赤外線吸収スペクトル

(単糖, 二糖類, 糖アルコール)

単糖, 二糖類及び糖アルコールの赤外線吸収スペクトルの違いについて考察する。分析した糖類を表1に示す。

表1 分析した糖類

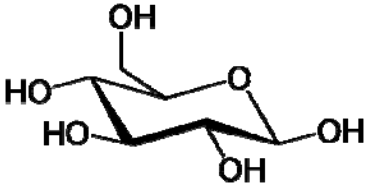
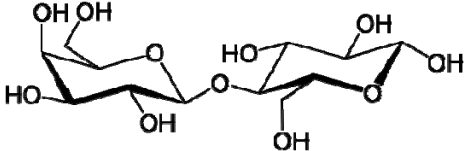
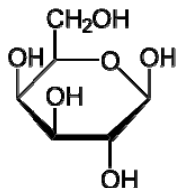
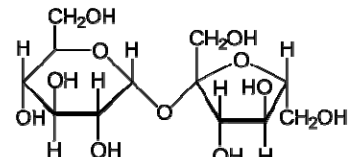
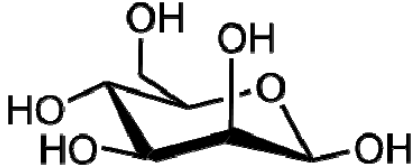
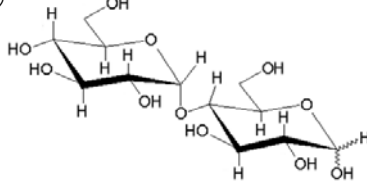
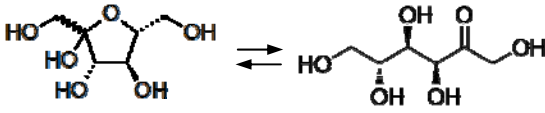
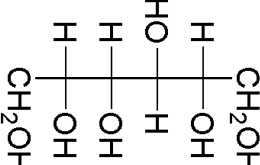
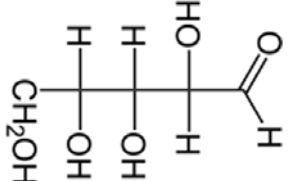
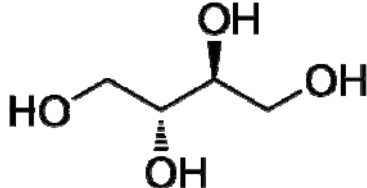
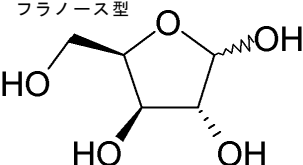
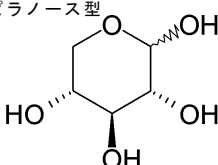
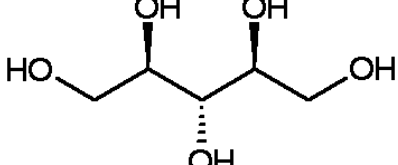
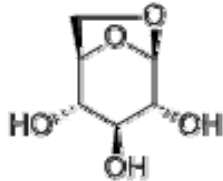
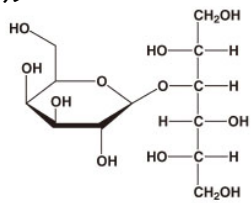
種類	名称と構造式	種類	名称と構造式
単糖類	グルコース (ブドウ糖) 	二糖類	ラクトース (=ガラクトース+グルコース) (乳糖) 
	ガラクトース (脳糖) 		スクロース (=グルコース+フルクトース) (ショ糖) 
	マンノース 		マルトース (=グルコース+グルコース) (麦芽糖) 
	フルクトース (果糖) 	糖アルコール	ソルビトール 
	アラビノース 		エリスリトール 
	キシロース フラノース型  ピラノース型 		キシリトール 
その他	アンヒドログルコース 		ラクチトール 

表2 糖類の赤外線吸収スペクトル

種類	赤外線吸収スペクトル	種類	赤外線吸収スペクトル
単糖類	グルコース（ブドウ糖） 	二糖類	ラクトース（＝ガラクトース＋グルコース）（乳糖）
	ガラクトース（脳糖） 		スクロース（＝グルコース＋フルクトース）（ショ糖）
	マンノース 		マルトース（＝グルコース＋グルコース）（麦芽糖）
	フルクトース（果糖） 		ソルビトール
	アラビノース 		エリスリトール
	キシロース 		キシリトール
その他	アンヒドログルコース 		ラクチトール

単糖，二糖類および糖アルコールの赤外線吸収スペクトルについて明らかとなった事項は以下の通りである。

- (1) 糖類の赤外線吸収スペクトルに共通しているのは，①水素結合による 3200cm^{-1} 付近の吸収帯，② 1020cm^{-1} 前後のシャープで大きな吸収帯，③ $1450\sim1200\text{cm}^{-1}$ の微細ないくつもの吸収帯である。
- (2) 多糖類も単糖などと同様の波数に吸収帯を有しているが，単糖等の方がすべての吸収帯がシャープである。
- (3) 構造の類似した糖類であっても僅かに赤外線吸収スペクトルが異なることから，単体であれば赤外線吸収スペクトル分析で識別できるものと考えられる。

以上