

赤外の活用度がアップします

「赤外スペクトルによる プラスチック・エラストマーの定性」

Vol.3

実践マニュアル (2)：マーカークピークによる構造類縁体の識別

■シリーズの構成

「赤外スペクトルによるプラスチック・エラストマーの定性」

Vol.1 基盤編：赤外スペクトルの読み方

Vol.2 実践マニュアル (1)：逆引き式 未知スペクトルの定性法

Vol.3 実践マニュアル (2)：マーカークピークによる構造類縁体の識別

Vol.4 参照編：主要ポリマーのピーク帰属集

実際の定性には Vol.2 と Vol.3 を用いるが、Vol.1 を読んで基盤知識を習得しておけば、よりスムーズな利用につながり、応用力も身に着く。

Vol.4 は、スペクトルを深く解析したい場合の参考のためであり、定性に不可欠ということではない。

■本書の狙い

ポリマーには構造類縁体が多い（炭素数が異なるだけの同族体、共重合体等）。

当然、赤外スペクトルは類似しており、一見、識別が困難なことも多い。

本書は、類縁体が多いポリマーグループを取り上げ、類似するスペクトルのどこに着目して識別するか示した。

■本書の識別のスキーム

<マーカークピーク>

前述のように、構造類縁体のスペクトルは類似しており識別が困難に見えることも多い。

しかし、赤外は想像以上に精緻であり、細かく診れば、構造の僅かな違いがスペクトルに反映されている。

本書では、識別の指標となるピークを「マーカークピーク」と名付け、類縁体の個々について、どのピークが「マーカークピーク」になるかを具体的に示した。

<前操作：タイプ分け>

たとえばポリアミドは 40 余りの類縁体がある。「マーカークピーク」が合うものを探すのは容易ではない。

そのため、スペクトルの別の特徴に着目して、5 種のタイプ（脂肪族、フタルアミド等々）に仕分けして、合致するタイプ内でのみ「マーカークピーク」を指標に照合するようになっている。

■本書の対象

プラスチック・エラストマーの中で、類縁体が多いグループが主体。詳しくは 3 頁参照。

■本書の使用法

以上のような内容なので、サンプルのタイプが判っている（たとえばポリアミド）ことが前提になる。

①Vol.2 との併用：Vol.2 で定性したら「ポリアミドなので、細かい識別は Vol.3 へ」と指示されたケース

②コンピュータ検索との併用：

ポリアミド類が検索結果の上位を占めた場合、ポリアミドであることは確かだとしても、どういうポリアミドであるかは分析者が確認する必要がある。本書は吟味に使える。

③単独使用：たとえば、分析者がスペクトルを診てポリアミドと判断した場合

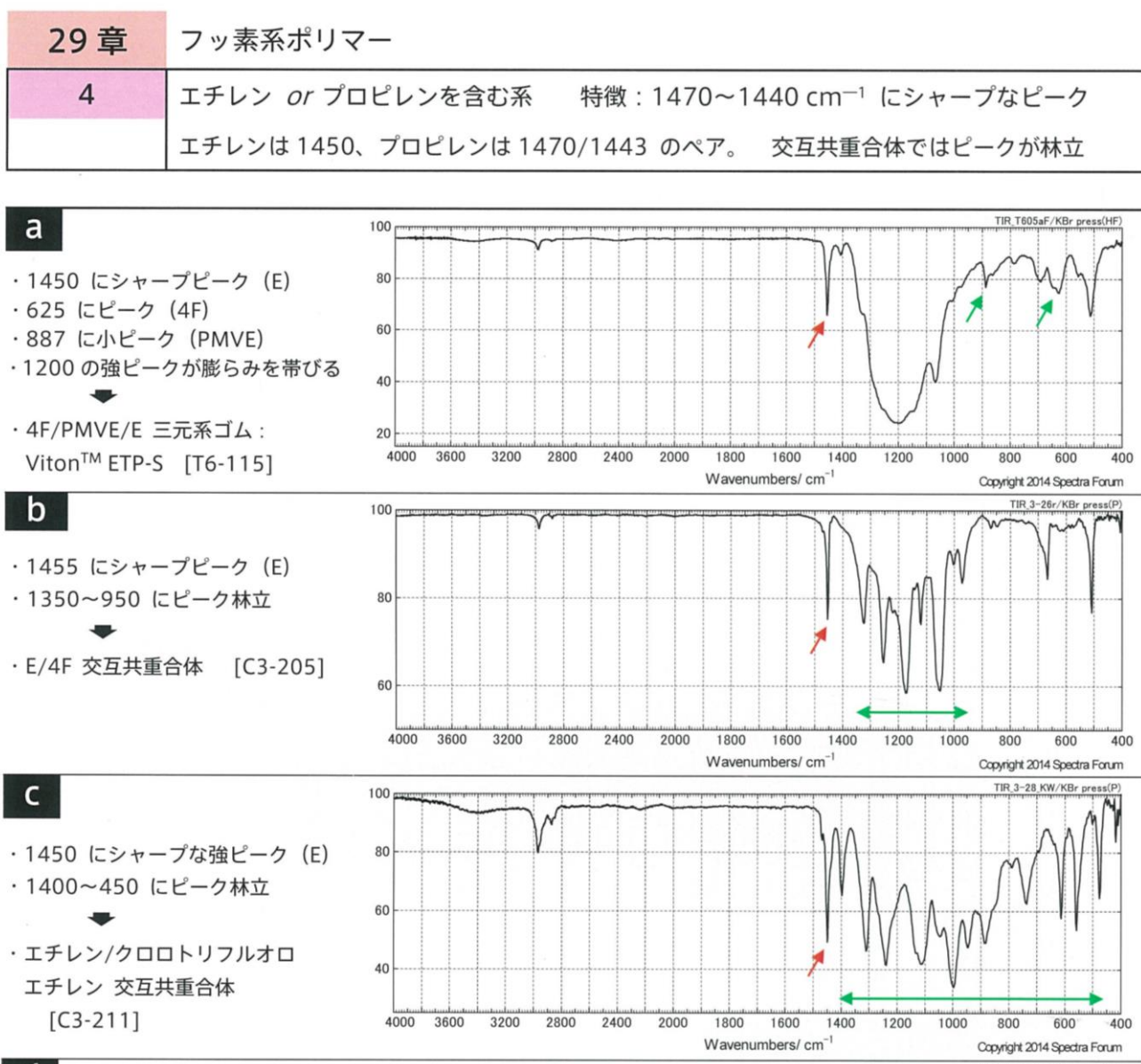
■ 頁のイメージ

ポリマーのタイプ別に章が設けられている。

図の「29 章」はフッ素系ポリマーである（プラスチックかエラストマーかは問わず、全てを含む）
29 章の最初の頁で、スペクトルの大きな特徴でフッ素系ポリマーを 4 タイプに仕分け。

図は、4 番目のタイプで、共通する特徴が上段の枠内に記載されている。

a、b、c・・・は、これに該当するポリマーで、個々を識別できる細かいピークが明示されている。
全体の照合の論理（並列式 Decision Tree 法）と頁のスタイルは、Vol.2 と全く同じである。



■ 仕様等

著者：高山 森（スペクトラ・フォーラム、元三菱化学）

本体：A4、176 頁、リング製本、部分カラー印刷、収載スペクトル数：419 個

付録 CD：構造式（本文中の各スペクトルに対応）、各種索引（紙版は別売り）

価格（税前）：37,000 円（シリーズの複数購入のセット価格あり）

スペクトラ・フォーラム（代表：高山 森）

企画・制作

512-0903 三重県四日市市小杉新町 176-1

Tel & Fax 059-330-5511 spctrf@themis.ocn.ne.jp

収載ポリマーのタイプと点数

	タイプ	点数
21 章	ポリエチレン：プラスチック & エラストマー	22
22 章	ポリエチレン変性物：ビニルモノマーとの共重合体他	29
23 章	ポリプロピレン：プラスチック & エラストマー	25
24 章	オレフィン系エラストマー	9
25 章	環状オレフィンポリマー	9
26 章	不飽和炭化水素系 (仕分けのみ)	(5)
27 章	スチレン系ポリマー：プラスチック & エラストマー	60
28 章	塩化ビニル系：プラスチック & エラストマー	15
29 章	フッ素系ポリマー：プラスチック & エラストマー	25
30 章	ポリアクリル酸エステル	41
31 章	テレフタル酸系ポリエステル	17
32 章	ヒドロキシエステル類	18
33 章	エーテル系ポリマー (仕分けのみ)	(20)
34 章	ポリケトン	5
35 章	ポリサルホン	3
36 章	ポリアミド (蛋白系を含む)	49
37 章	イミド系ポリマー	15
38 章	ウレタン系ポリマー	26
39 章	エポキシ樹脂系	34
40 章	フェノール樹脂、アミノ樹脂、シアネート樹脂	10
41 章	シリコーン系：プラスチック ・ エラストマー ・ オイル	16
		419

註

本書は、Vol.2 の続きという性格があり、21 章から始めている。

一部のポリマーは、Vol.2 と重複している。

ここに出ていないグループは、Vol.2 内で完結している。

【印刷見本】各章の最初に「章のガイド」があり、第二の特徴に従った「タイプ分け」を行っている。
細かい識別は、該当するタイプの頁で行う（その方が照合するスペクトルが少なくい）。
下のテレフタル酸エステル系では、6タイプに仕分けしている。

31章 ポリエチレンテレフタレート & 類縁体

1. 本章の対象

本章の対象は、テレフタル酸と脂肪族や脂環族ジオールから得られるポリエステル4種類 Homo および 共重合体であり、ポリアリレート、および、コーティング用の複雑なコポリエステルは対象外である（前者については70頁参照）。

ポリエチレンテレフタレート (PET)

ポリトリメチレンテレフタレート (PTT)

ポリブチレンテレフタレート (PBT)

ポリシクロヘキシレンジメタノールテレフタレート (PCT)

2. テレフタル酸系ポリエステルのスペクトルの特徴

テレフタレートに共通するピークは、1250、1020、730 cm^{-1} 付近の3本であり、これで他のエステルと識別できる。

基本：ポリエチレンテレフタレート

・テレフタレート共通の特徴

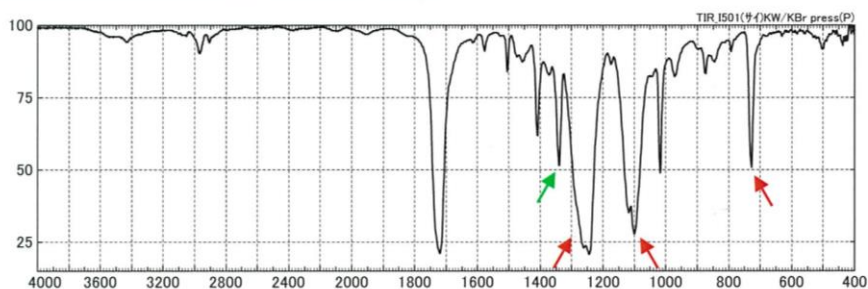
1250、1020、730 付近の3本

・PETの特徴

CH₂伸縮：2970と2907

CH₂縦揺れ：1339

⇒ 289頁a



3. グループ内の識別

スペクトルを順番に眺めても定性は可能であるが、構造の違いが現れやすい領域に注目すると効率的である。

■着目点-1：3000～2800 cm^{-1} に出るピークの形状 CH₂連鎖長等を反映

ポリエチレンテレフタレートでは2970と2907 cm^{-1} であり、CH₂伸縮としては高波数である（Oの隣接効果）。

これとはピーク位置や形状が明快に異なるものがあり、判りやすい特徴になる。

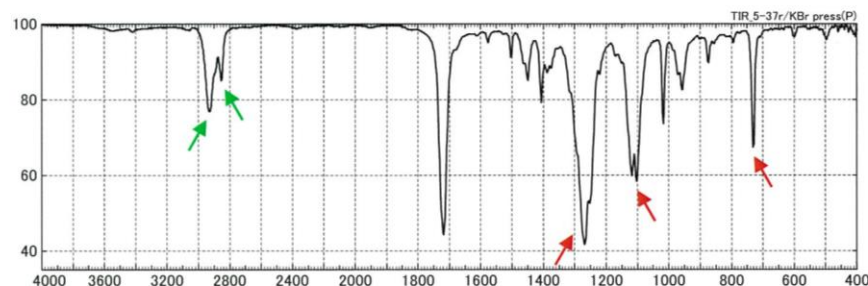
<タイプ-1a>

・2929と2854の2本
(ほぼ通常的位置)



・PCT系：ホモ & 共重合体

⇒ 該当すれば292頁へ



<タイプ-1b>

・離れた2本。強度はほぼ同程度

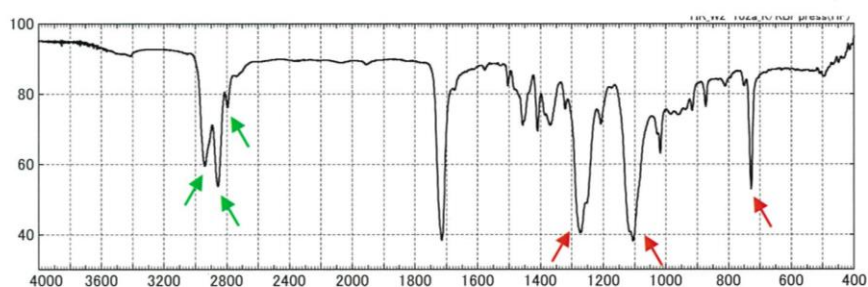


・PTMG共重合系：2796に小ピーク

⇒ 該当すれば291頁d～eへ

・スピログリコール共重合PET：
2973と2846

⇒ 290頁g



<タイプ-1c>

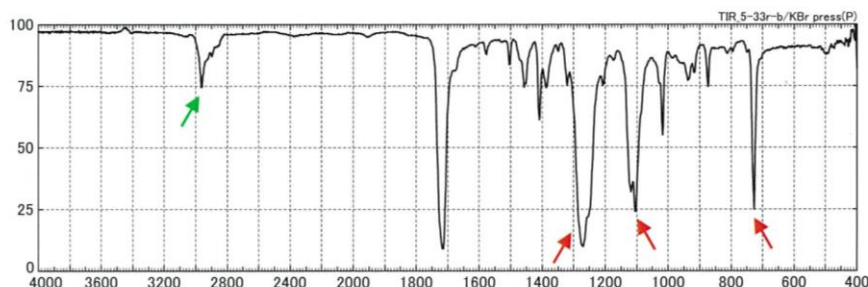
・CH₂伸縮が尖った1山ピーク：2963



・PBTホモ

⇒ 該当すれば291頁aへ

註：共重合体では曖昧になる



【印刷見本】テレフタル酸エステル系の中の4番目のタイプ（PCT系）の最終レベルの識別を行う頁。
PCT系に共通する特徴が上段の枠内に記されている（章のガイドで既出）。
a、b、c・・・はPCT系の構造類縁体で、それぞれを識別できるピークが明示されている。

31 章 ポリエチレンテレフタレート & 類縁体

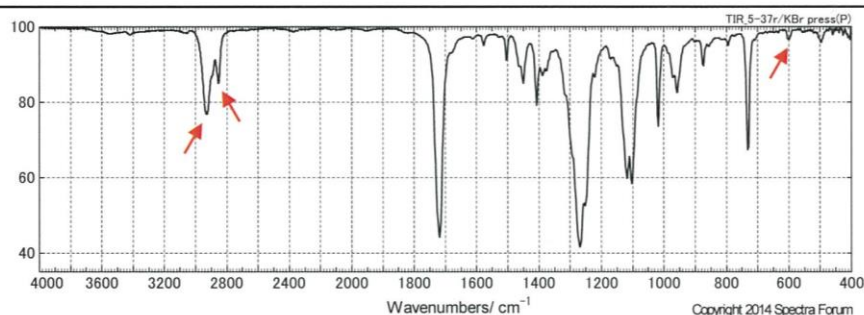
4	ポリシクロヘキシレンジメチレンテレフタレート（PCT）	マーカー：602の小ピーク
	その他の特徴：CH ₂ 伸縮が2929と2854（通常と変わらない）	

a

基本：

- ・ポリシクロヘキシレンジメチレン
テレフタレート ホモ（PCT）
- ・マーカー：602の小ピーク
- ・CH₂伸縮：2929と2854
- ・1340：ピーク無し

[I6-101]



b

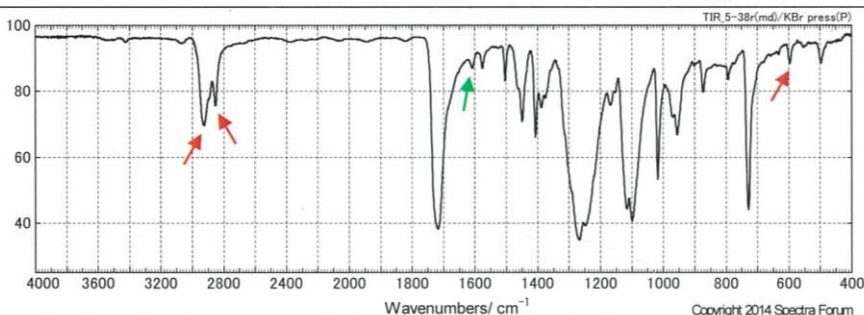
a とほぼ一致するが

- ・1608 に微弱ピーク



- ・イソフタル酸共重合 PCT（PCT-A）

[I6-211]



c

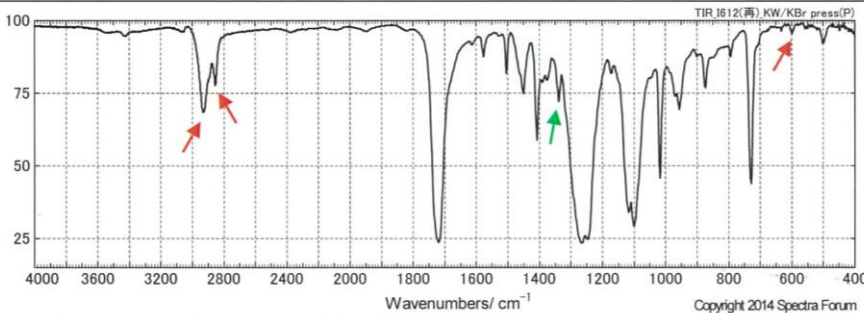
a とほぼ一致するが

- ・1338 に小ピーク



- ・エチレングリコール共重合 PCT（PCT-G）

[I6-222]



d

- ・1375 に微弱ピーク

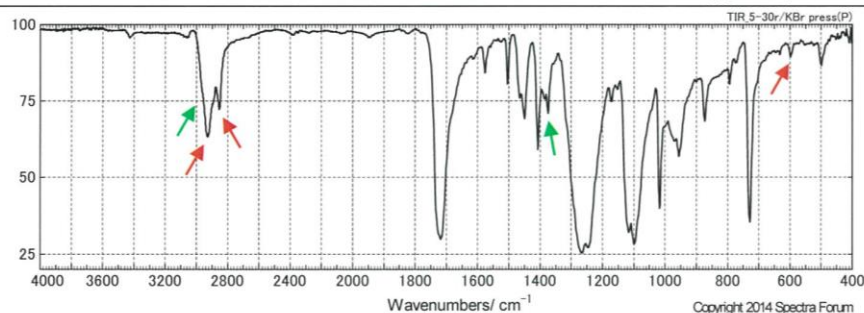
- ・2928 のピークが僅かに膨らむ



- ・テトラメチルシクロブタンジオール
共重合 PCT：Tritan™

[I6-225]

註：上の特徴はメチル基に由来



<本頁の補足>

ヘキサシクロヘキサン環が導入され CH₂ 連鎖が長くなった効果で、CH₂ 伸縮がポリエチレンの波数に近づく。

タイトル欄に記載した PCT の特徴は、b～d の共重合体でも現れている。

本頁の c と前々頁の g は、定性的には同一構造で、エチレングリコールとシクロヘキシレンジメタノールのどちらが多いかというだけの違いである。本頁 c は後者が、前々頁 g は前者が多い。

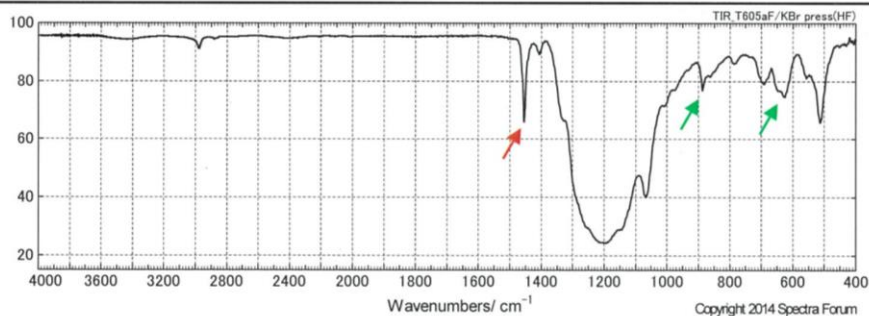
【印刷見本】 フッ素系ポリマーの最終レベルの識別を行う頁である。
 見本は、エチレンまたはプロピレンを含む共重合体系。
 これらに共通する特徴（上段）と、個々が識別できるピークが明示されている。

29 章 フッ素系ポリマー

4	エチレン <i>or</i> プロピレンを含む系 特徴：1470～1440 cm^{-1} にシャープなピーク エチレンは 1450、プロピレンは 1470/1443 のペア。 交互共重合体ではピークが林立
---	---

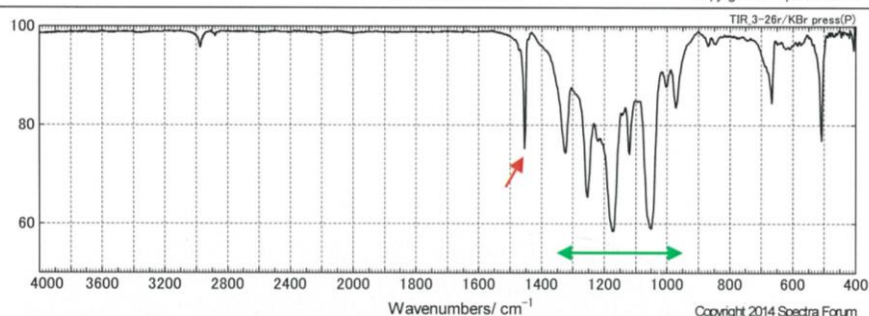
a

- ・ 1450 にシャープピーク (E)
 - ・ 625 にピーク (4F)
 - ・ 887 に小ピーク (PMVE)
 - ・ 1200 の強ピークが膨らみを帯びる
- ↓
- ・ 4F/PMVE/E 三元系ゴム：
Viton™ ETP-S [T6-115]



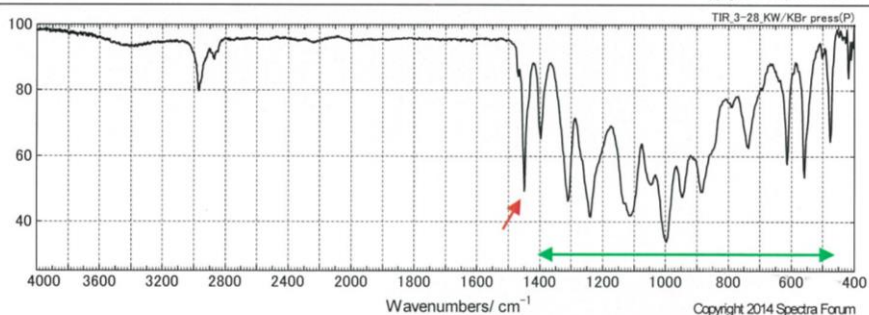
b

- ・ 1455 にシャープピーク (E)
 - ・ 1350～950 にピーク林立
- ↓
- ・ E/4F 交互共重合体 [C3-205]



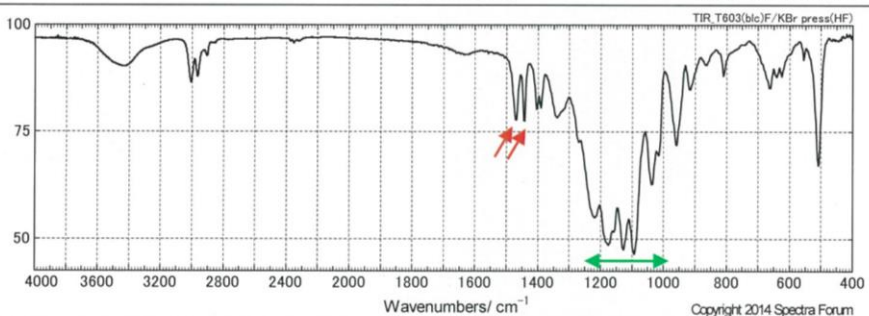
c

- ・ 1450 にシャープな強ピーク (E)
 - ・ 1400～450 にピーク林立
- ↓
- ・ エチレン/クロロトリフルオロ
エチレン 交互共重合体
[C3-211]



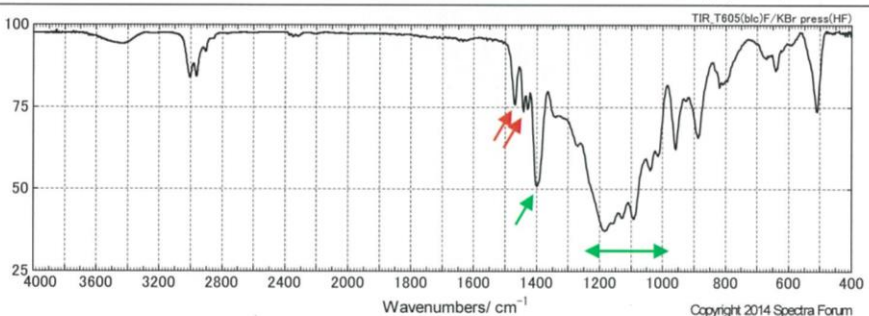
d

- ・ 1470 と 1443 のペア (P)
 - ・ 1400 付近に二重小ピーク
 - ・ 1250～1000 に房状ピーク
- ↓
- ・ 4F/P 交互共重合体：Aflas™ 150E
[T6-111]



e

- d に類似するが
- ・ 1400 に中幅ピーク (1429 とのペアであり、2F/4F を示唆)
- ↓
- ・ 2F/4F/P 三元系：Aflas™ 200
71/16/13 by mol [T6-113]



(次頁下段へ続く) ▶