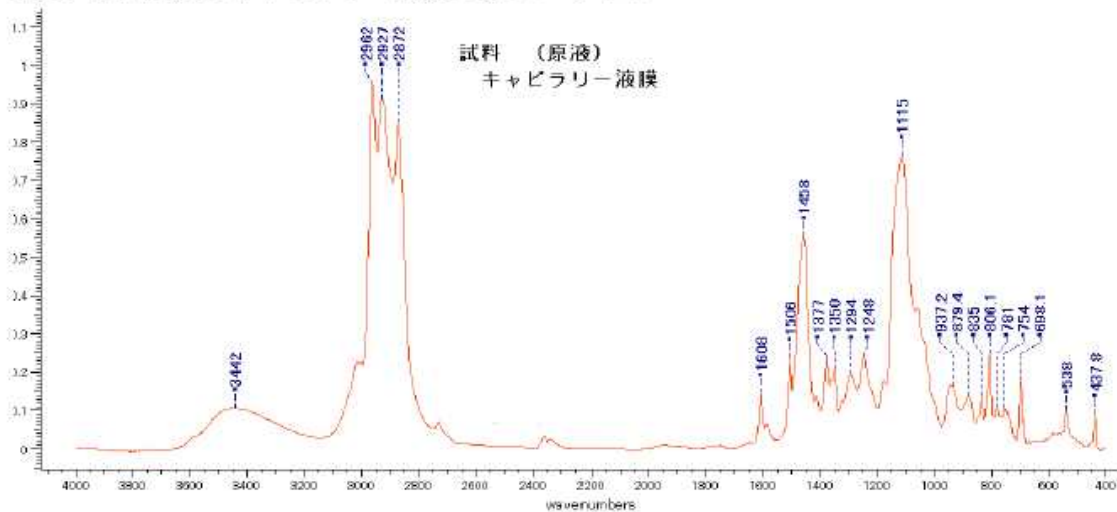


[依頼元での経緯と依頼事項]

芳香族系溶剤に溶解された高分子材料と推察される物質の溶液の成分組成が明確でなく、この詳細を明らかにし、CAS 番号などを知ることを目的とする。

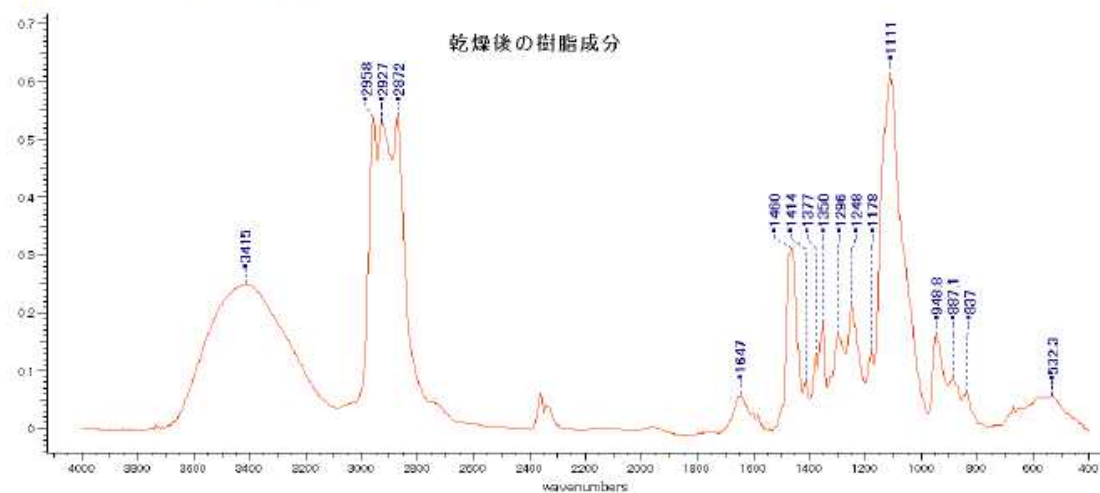
[IR スペクトル]

IR-1 試料原液のキャピラリー液膜の IR スペクトル



(解釈) 主体はポリエチレングリコール (POE と略) 系物質で、芳香族混合溶剤類に溶解している。

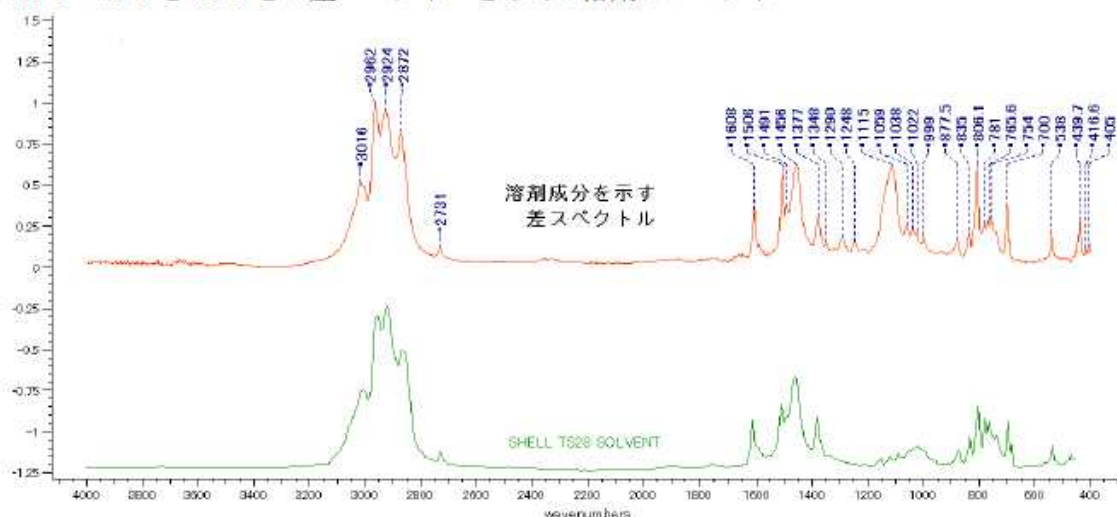
IR-2 加熱乾燥した樹脂成分の IR スペクトル



(解釈) 芳香族溶剤が蒸発したが、ポリエチレングリコール (POE と略) 系物質には微量の芳香族成分が含まれていることが推察される。

(溶剤成分の解析)

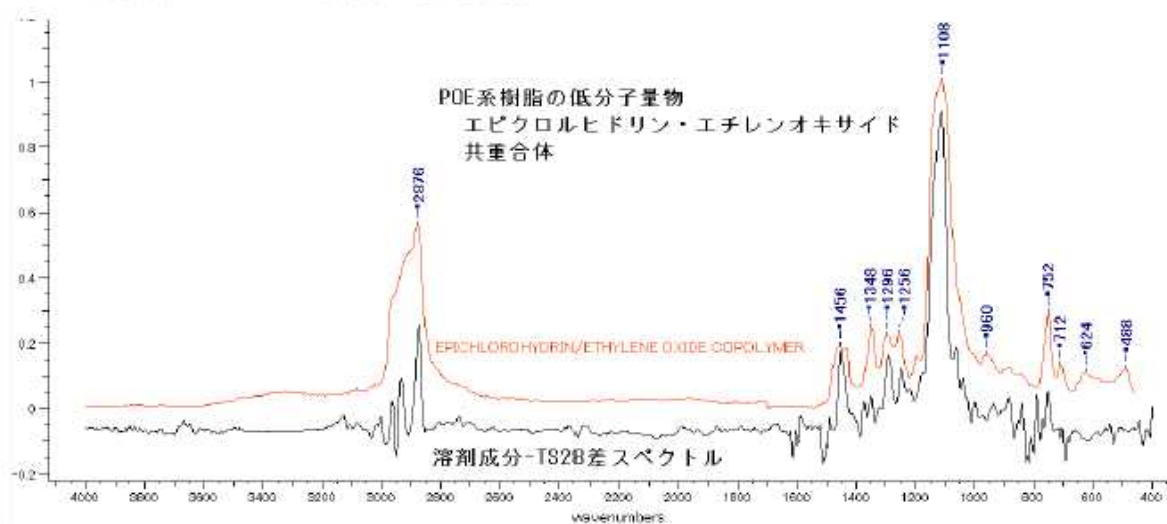
IR-3 IR-1 と IR-2 との差スペクトルとしての溶剤のスペクトル



(解釈) 参考スペクトルは Shell 社の石油系溶剤 TS-28 でパラフィン系炭化水素 12.4%、ナフテン系炭化水素 12.1%、芳香族系炭化水素 75.5% (Wt%) の混合物である。芳香族炭化水素には *o,m,p* キシレン、その他アルキルベンゼン類が含まれる。

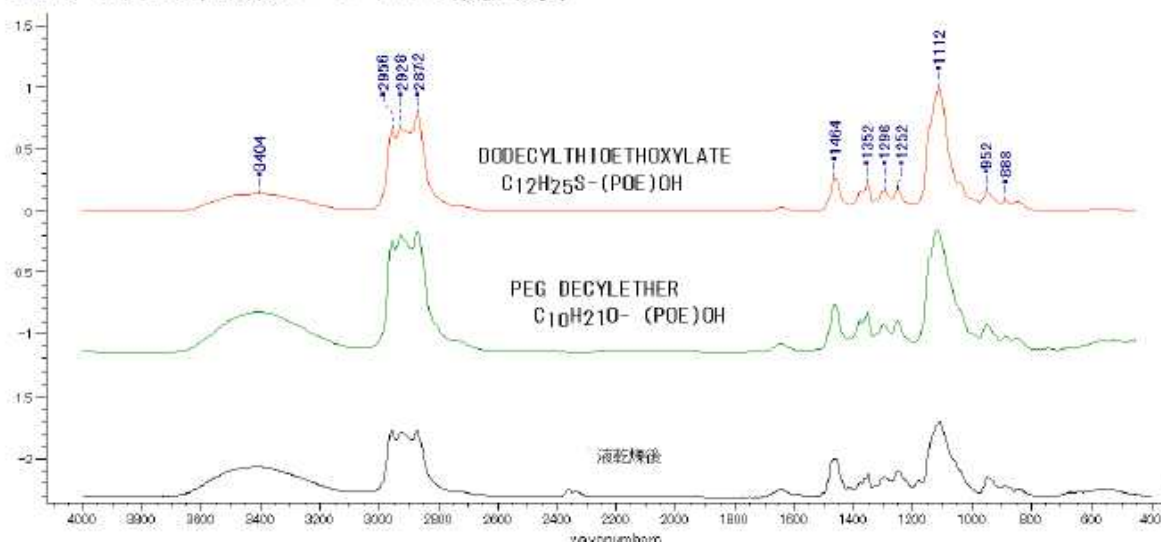
1115 cm^{-1} は POE 由来のエーテル基で、加熱で蒸発するエーテル系溶剤の混在を伺わせる。可能性として IR-4 の PEG の原料モノマーに近い低分子の残留オリゴマーが推定される。

IR-4 溶剤中のエーテル成分の候補物質



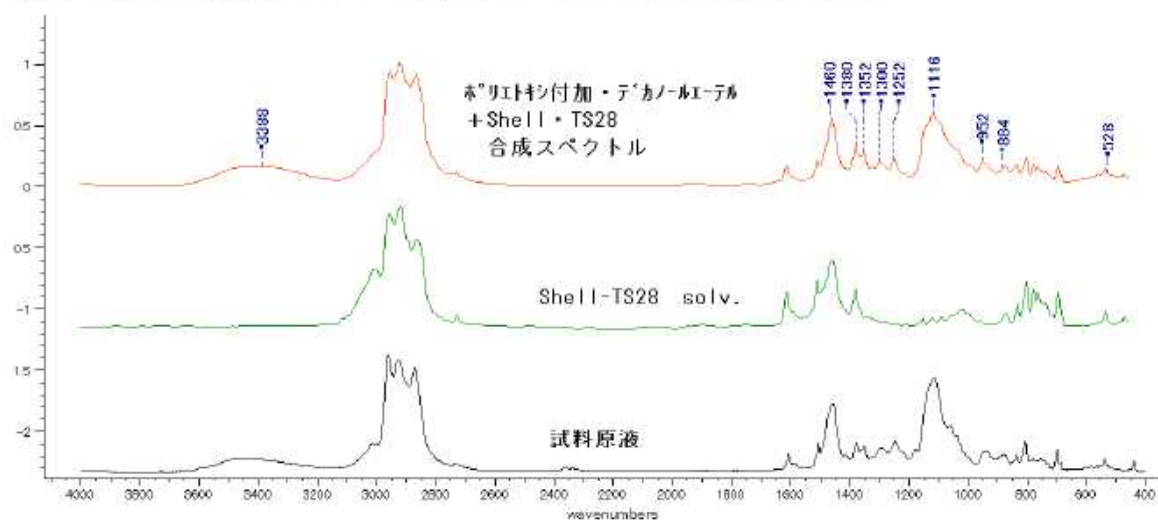
(成分組成の解析)

IR-5 IR-2 の乾燥物スペクトルの類似物質



(解釈) ポリグリコールのうち POE に分岐形アルキル基高級アルコールを付加させた非イオン系界面活性剤であり、3000cm⁻¹ 付近のアルキル基パターンと相対強度バランスから原料の高級アルコールは C10~C13 と推察される。パター的には C10 (POE/デカノールエーテル) が近い。類似物として高級チオアルコールを原料とする非イオン界面活性剤もパターンからの判別が困難な珍しい例となり、X 線情報としての S 元素有無判定が必要である。

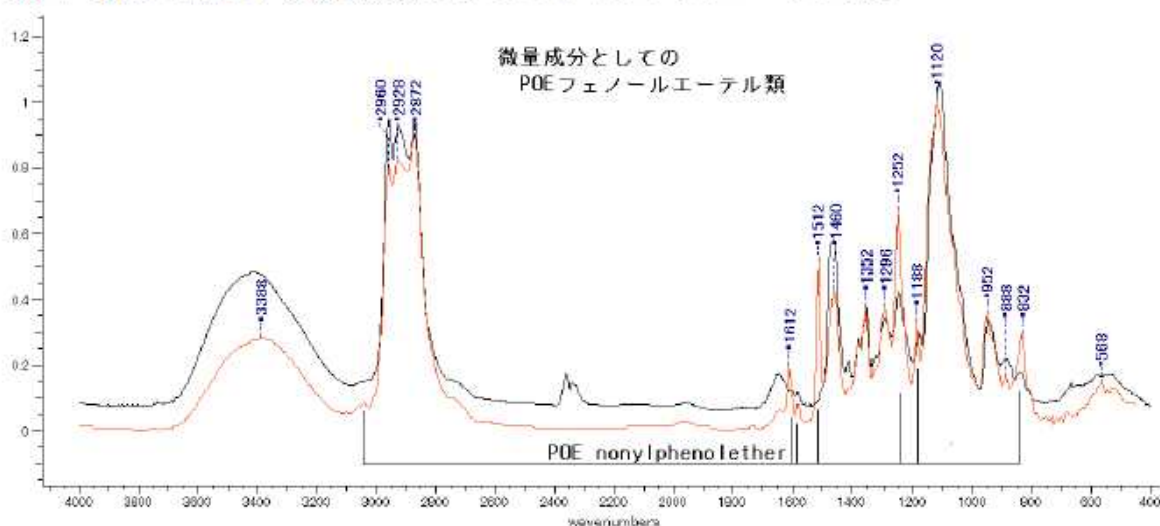
IR-6 試料原液の IR パターンを標準物スペクトルの合成により再現



(解釈) POE/デカノールエーテル 55%に 45%の Shell TS-28 溶剤を加えると試料原液に近い IR スペクトルパターンが得られる。この混合割合はスペクトル強度からのものであり、重量混合比と一致するものではない。

(微量成分の解析)

IR-7 PEG に混在する微量成分としてのアルキルアシルエーテル物質



(解釈) 図に挿入した縦線はアルキルアシルエーテル物質のひとつである POE・ノニルフェノールエーテル界面活性剤 (潤滑剤、可塑剤でもある) の特徴的なピーク位置で、主剤 POE・デシルエーテルに対して 5-10% レベルで混合していると推定される。

[結論]

1. 主剤と混在物概略組成

ポリエチレングリコール・デシルエーテル 約 55%

Ethoxylated decyl alcohol, Decyloxy(ethyleneoxy)ethanol,

Polyoxyethylene decyl ether

CAS 26183-52-8

$C_{10}H_{21}O-(CH_2CH_2O)_n-H$ (n=8 として分子量: 510)

ポリエチレングリコール・ノニルフェニルエーテル 約 3-6%

Polyethylenglycol nonylphenyl ether, Nonylphenyloxy(ethyleneoxy)ethanol,

polyoxyethylene decyl ether

CAS 9019-45-9

$C_9H_{19}-\Phi-O-(CH_2CH_2O)_n-H$

石油系溶剤 (Shell 社の石油系溶剤 TS-28 ないし同等品) 約 40%

パラフィン系炭化水素 12.4%、CAS 8030-30-6

ナフテン系炭化水素 12.1%、CAS 64742-95-6

芳香族系炭化水素 75.5% (Wt%) 混合キシレン CAS 1330-20-7、

各種アルキルベンゼン類混合 CAS . . .

微量混在物 ポリエチレングリコール類低分子オリゴマー

注1) S 元素分析の結果高濃度の S が確認された場合、IR スペクトルの同定における判別不能の特殊ケースとして、

主剤はエチレングリコールドデシルチオエーテル、

Dodecylthioethoxylate CAS 9004-83-5 に差し替える必要がある。

$C_{12}H_{25}-S-(CH_2CH_2O)H$

注2) 検出成分はいずれも無色物質であり、試料液色の褐色を説明できない。

IR スペクトル直接観察では本報告が限界であり、これ以下のレベルではクロマトグラフィーを含めた分離濃縮を介した IR 分析が必要である。

表1 IR スペクトルに見られる官能基

波数 cm^{-1}	官能基帰属	構造単位
3442	水酸基伸縮振動	—OH
2962	メチル基伸縮振動	—CH ₃
2927/2872	メチレン基伸縮振動	—CH ₂ -CH ₂ —
1610	ベンゼン環	-C ₆ H ₅ (Φ)
1508	ベンゼン環	-C ₆ H ₅ (Φ)
1460	メチレン基,	-CH ₂ -
1408	極性基隣接メチレン基	-CH ₂ -O-(X ; O)
1377	メチル基	—CH ₃
1294	メチレン基ひねり振動	-CH ₂ -
1248	メチレン基ひねり振動、芳香族エーテル	-CH ₂ -, (Φ) -O-
1178	芳香族エーテルの C—O 伸縮	Φ—O—R
1111	グリコールエーテルの C—O 伸縮	R—O—R
948	水酸基の C—O 伸縮	-CH ₂ -OH
835	芳香族環面外水素振動	-(Φ)-H-
530	グリコール C—O ひねり振動	-C—O—C-

以上