

[概要]

使用している防錆剤含有の酸洗浄液（現行品）と同等の効果が期待できる酸洗浄液を新規の防錆剤を用いて調製することが目的。市販の酸洗浄液数種類と現行品について電気化学試験を行い、現行品と同等の効果があつた市販品を調べた。その市販品に含有している防錆剤について、核磁気共鳴分光分析（以下、NMR と略記）、質量分析（以下、MS と略記）および元素分析による構造解析を行った。

化学構造が判明した防錆剤と鉄イオンとの反応機構を調べ、腐食抑制機構を明らかにした。

[特徴]

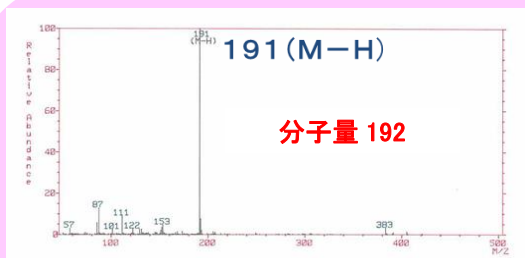
- ・ 機器分析の特徴を生かしたスペクトル解析
- ・ 分子軌道法による錯体の安定構造
- ・ 分析だけでなく製品の使用効果評価

[分析手順]

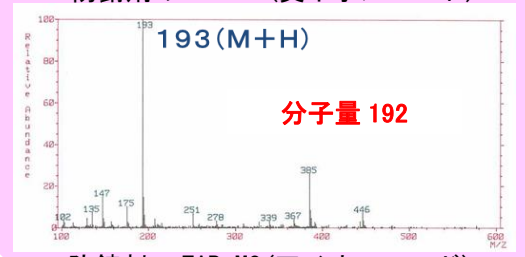
機器分析によるスペクトル解析を中心に、それぞれの特徴を生かして、整合性をとった総合解析

- ① 蛍光X線分析 (EDX)・元素の定性
- ② 赤外分光分析 (IR)・化学構造(官能基)の確認
- ③ 高速原子衝突イオン化-質量分析 (FAB-MS)
 - ・ 分子量の決定
- ④ 元素分析・原子組成(化学式)の決定
- ⑤ 核磁気共鳴分光分析 (NMR)・化学構造の決定
 - ¹H-NMR
 - ¹³C-NMR
 - DEPT (炭素の種類決定)
 - C-H関連 2次元

[分析結果] FAB-MS、元素分析(CHNO)、NMR



防錆剤の FAB-MS (負イオンモード)



防錆剤の FAB-MS (正イオンモード)

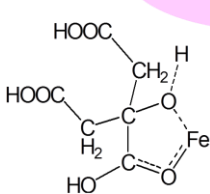
表. 防錆剤の元素分析結果

元素	炭素 C	水素 H	窒素 N	酸素 O	合計
含有割合 [wt%]	37.1	4.3	0.1未満	58.6	100
原子数比	6	8	-	7	-

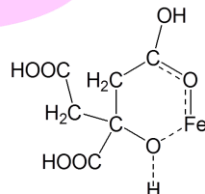
原子数比より、分子式 **C₆H₈O₇** と推定

MSの結果 **分子量192** と一致

5員環および6員環の錯体を形成
高分子錯体 ⇒ 沈殿皮膜を形成
腐食抑制



5員環



6員環

キーワード：防錆剤 構造決定 腐食抑制 NMR FAB-MS EDX IR 2次元

カルボニル基 C=Oに隣接する炭化水素

カルボニル基 C=Oに隣接する炭化水素

¹H-NMRスペクトル

2-プロパノール-1,2,3-トリカルボン酸
C₆H₈O₇, MW 192

¹³C-NMRスペクトル (COM)

CH関連

直接結合しているC-Hの相関信号を観測

CH遠隔相関

C-C-H, C-C-C-Hの相関信号を観測

防錆剤の ¹H, ¹³C および 2次元 NMR