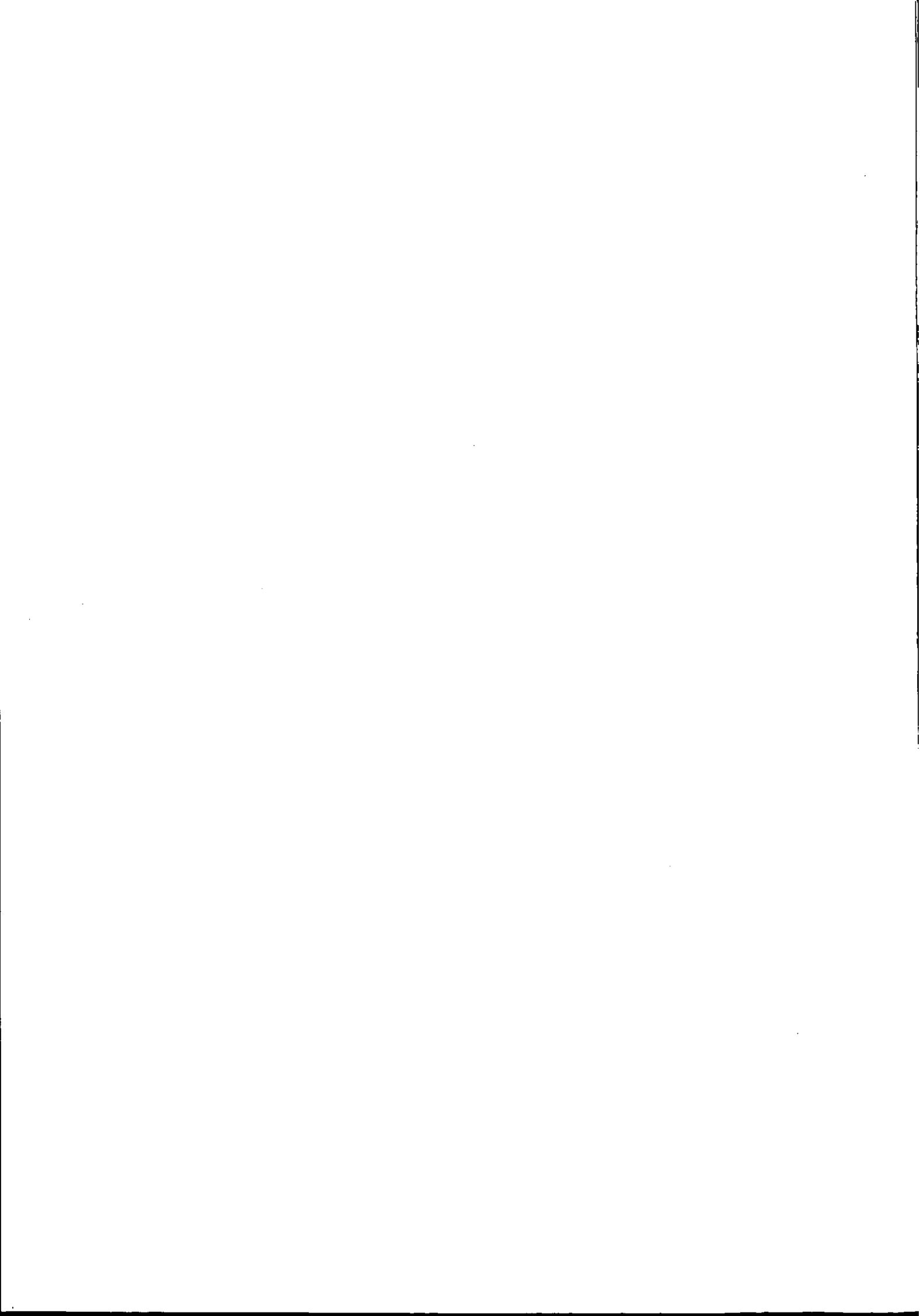


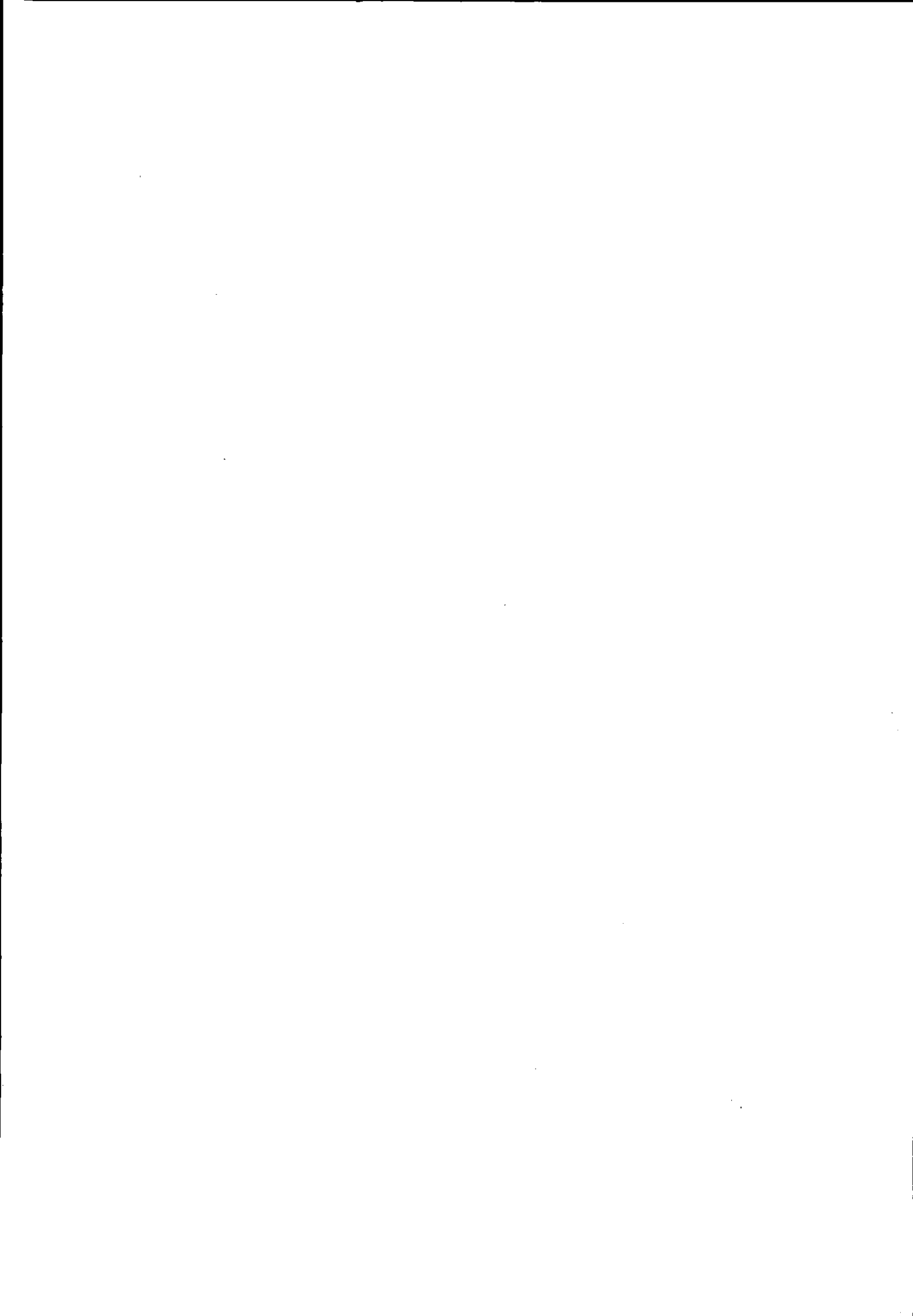
データベース構築促進及び技術開発に関する報告書

イオンクロマトグラフィー・データベース構築

平成2年3月

財団法人 データベース振興センター  
委託先 株式会社 科学新聞社

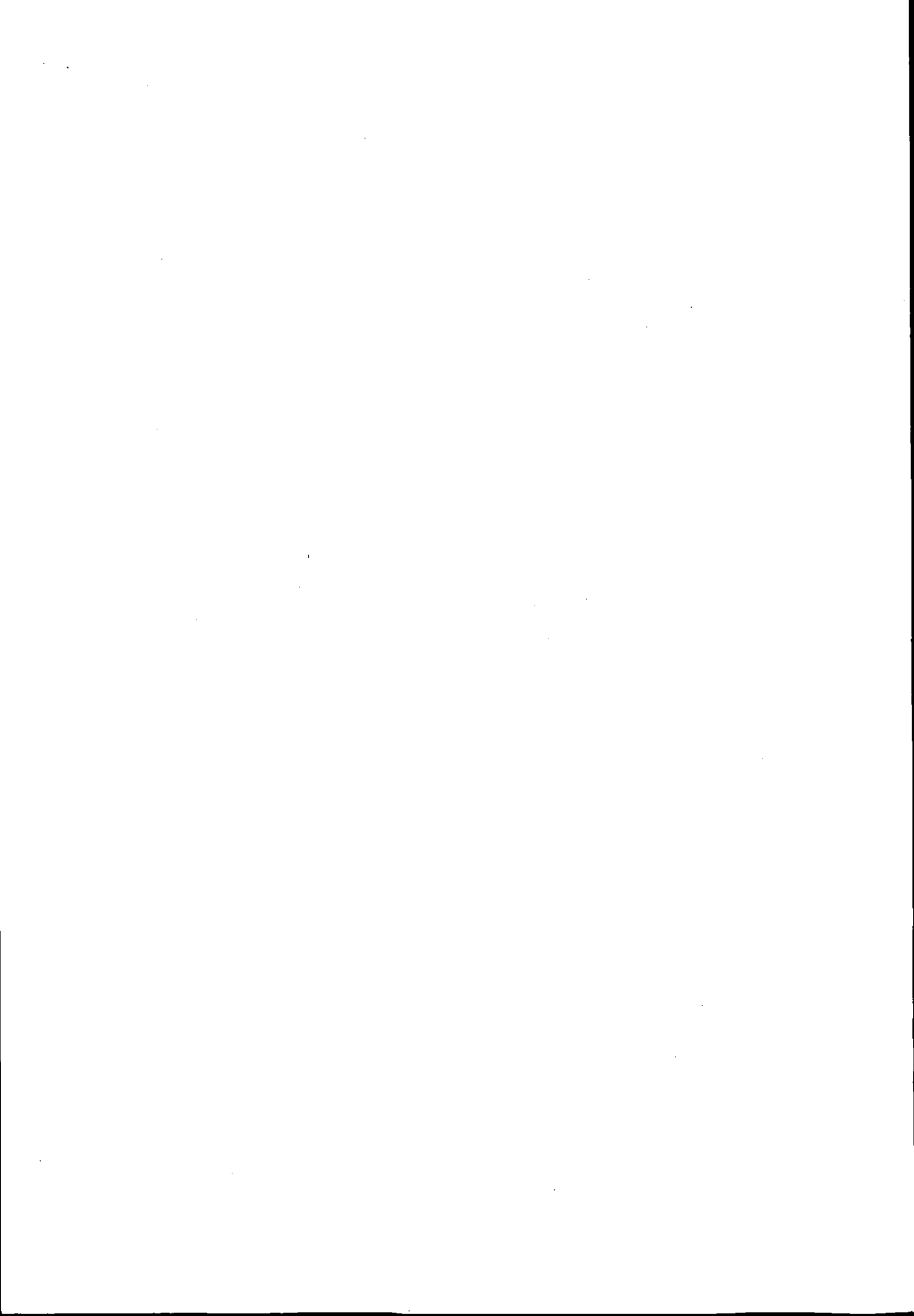




本報告書は、日本自転車振興会から競輪収益の一部である機械工業振興資金の補助を受けて作成したものである。

# 目 次

1. 概 要 -----	1
1.1 研究の目的とその内容 -----	1
1.2 実施体制・委員会構成 -----	2
1.3 委員会運営概要 -----	4
2. データの収集と選択 -----	9
2.1 オリジナルデータの収集 -----	9
2.2 データの選択 -----	10
3. キーワードの選定 -----	11
3.1 データの分類 -----	11
3.2 検出器キーワード -----	14
3.3 分析法キーワード -----	15
3.4 元素別のキーワード -----	17
3.5 メーカー別 -----	19
4. 検索法の一例 -----	20
5. 本研究による波及効果と今後の課題 -----	26
5.1 今後の課題 -----	26
付 録 -----	27
操作説明書 -----	28



## 序

データベースは、わが国の情報化の進展上、重要な役割を果たすものと期待されている。今後、データベースの普及により、わが国において健全な高度情報化社会の形成が期待される。さらに海外に対して提供可能なデータベースの整備は、国際的な情報化への貢献および自由な情報流通の確保の観点からも必要である。しかしながら、現在わが国で流通しているデータベースの中でわが国独自のものは1/4にすぎないのが現状であり、わが国データベースサービスひいてはバランスある情報産業の健全な発展を図るためには、わが国独自のデータベースの構築およびデータベース関連技術の研究開発を強力に促進し、データベースの拡充を図る必要がある。

このような要請に応えるため、(財)データベース振興センターでは日本自転車振興会から機械工業振興資金の公付を受けて、データベースの構築および技術開発について民間企業、団体等に対して委託事業を実施している。委託事業の内容は、社会的、経済的、国際的に重要で、また地域および産業の発展の促進に寄与すると考えられているデータベースの構築とデータベース作成の効率化、流通の促進、利用の円滑化・容易化などに関係したソフトウェア技術・ハードウェア技術である。

本事業の推進に当って、当財団に学識経験者の方々に構成されるデータベース構築・技術開発促進委員会(委員長 東京工科大学教授 西野博二氏)を設置している。

この「イオンクロマトグラフィー・データベース構築」は平成元年度のデータベースの構築促進および技術開発促進事業として、当財団が株式会社科学新聞社に対して委託実施した課題の一つである。この成果が、データベースに興味をお持ちの方々や諸分野の皆様方のお役に立てば幸いである。

なお、平成元年度データベースの構築促進および技術開発促進事業で実施した課題は次表のとおりである。

平成2年3月

財団法人 データベース振興センター

平成元年度データベース構築・技術開発促進委託課題

分野	課題名
社 会	1 気候情報データベースの構築 2 電磁波環境障害に関するデータベースの構築 3 災害情報シソーラスの構築 4 意味情報を中核とした医療評価データベースとコミュニケーションシステムの構築 5 ハンディキャップパーソンの情報ニーズに即したライフサポートデータベースの構築 6 博物館情報データベースシステムの構築 7 中央省庁での電子計算機利用に関する報告書のデータベース化
地域活性化 中小企業振興	8 沖縄地域における文化情報データベースの構築 9 九州地域の人材情報データベース構築に関する調査研究 10 高岡市商圏データベースの構築 11 地域の物産・人材・文化情報のデータベース構築と新しい地域間交流推進に関する調査研究
地 図	12 マルチメディア型地図データベース構築のための調査研究
エネルギー・資源	13 燃焼技術と燃焼装置設計のデータベース作成
部 品・材 料	14 技術支援システムにおける産業機械部品データベースの構築 15 マイクロコンピュータのプログラマブル周辺デバイスのデータベース構築
標 準 化	16 イオンクロマトグラフィー・データベースの構築 17 CD-ROMマルチメディアデータフォーマットの調査
海 外	18 データベースの構築のためのターミノロジーの調査研究
技 術	19 異種データから構成されるデータベースの総合的処理技術に関する調査研究 20 バイナリモデルに基づく先端的文書検索システムの開発



## 16. 「イオンクロマトグラフィー・データベースの構築」

### 16. 1 概要

イオンクロマトグラフィーは、水溶液中の無機陰イオン、無機陽イオン及び有機陰イオンなどを低交換容量のイオン交換体で分離して検出する分析方法で1972年にスモール(H. Small)らによって開発されたものである。

その後、この分析法の簡易性、迅速性及び検出感度の高いことなどの理由から、飛躍的な発展と普及を続けており、わが国におけるその分析装置の稼働台数は約3,000台、これにたずさわる分析技術者は約3,500人と推定される。

このような現状から、イオンクロマトグラフィーの標準化に関する検討も行われており、1988年にはISO(国際標準化機構)よりその標準化(案)が提示されているが、国内においてもJIS(日本工業規格)を中心にして厚生省、農林水産省、環境庁等における公定分析法として採用されつつある。一方、社団法人日本分析化学会イオンクロマトグラフィー研究懇談会(委員長 武藤義一)では、“イオンクロマトグラフィーデータブック”の出版を企画し、現在その執筆とデータの収集などが進められている。

以上のように、イオンクロマトグラフィの進歩と普及によるデータ数の増加、データの質的向上を目的とした標準化などを背景にし、イオンクロマトグラフィー研究懇談会の協力によって収集と編集を経た分析データを基礎にし、より広範囲で情報量の多い分析データベースの構築の必要性が考察される。

#### 16. 1. 1 研究の目的とその内容

イオンクロマトグラフィーは、水溶液中の無機陰イオン、無機陽イオン及び有機陰イオンなどをイオン交換体を用いて分離したのち、種々の検出器で連続的に検出し、各種のイオンの定性又は定量分析を行う手法であり、多数のイオン種を同時に分析できる特徴があることから、その学術的な価値は非常に高く、且つ実用的な応用範囲は極めて広い。特に、地下水、河川水、飲料水、湖沼水、海水、雨水及び雪などのなかに含まれている各種イオンの分析には不可欠な方法になっている。

したがって、今後イオンクロマトグラフィーにより得られる分析データは、膨大な数に達することが予想されることから、これらの分析データの標準化対策は急務と考えられる。

このため、イオンクロマトグラフィーの分析データの標準化の一貫として、データベースの構築を企画した。

基本的には、純水、標準溶液、環境化学、医学、薬学、生化学、農芸化学、食品化学、工業化学、電子工業、原子力産業、バイオテクノロジー及び分析条件（装置、溶離液と流量、カラムとカラム温度、イオンの濃度など）などのデータベースを構築する。

これらのデータベースをもとに、パソコン上で元素周期律表に基づく元素記号、族、原子番号、単原子イオン、多原子イオンなどの検索キーワードの他に、実用性のある機種別（メーカー別又は原理別）などの検索ソフトも開発する。

#### 16. 1. 2 実施体制・委員会構成

データベースの構築のためのデータの収集及び採択、編集作業を円滑に進め、更にデータベースの構築と機能評価を行うために、次のような構築委員会を構成すると共に、小委員会を構成して研究調査と実務を行った。各委員会の構成は次の通りである。

イオンクロマトグラフィー・データベース構築委員会

番号	氏 名	所属団体又は会社等名	役 職 名
1	(委員長) 鈴木 義 仁	山 梨 大 学 工 学 部	教 授
2	武 藤 義 一	埼 玉 工 業 大 学	学 長
3	本 間 春 雄	日本アナリスト(株) 分 析 技 術 研 究 所	所 長
4	及 川 紀久雄	新 潟 薬 科 大 学 環 境 衛 生 学 部	助 教 授
5	高 井 信 治	東 京 大 学 生 産 技 術 研 究 所	助 教 授
6	鈴 木 啓 子	理 化 学 研 究 所	分 析 技 師
7	金 子 忠 司	(株)ベルシステム研究所	社 長
8	加茂前 長 修	安 部 商 事 (株)	部 長
9	松 下 駿	東 ソ ー (株)	課 長
10	徳 田 俊 夫	昭 和 電 工 (株)	主 席 研 究 員
11	後 藤 良 三	東 亜 電 波 工 業 (株)	主 任
12	梶 原 久 雄	横 河 電 機 (株)	課 長 代 理
13	高 田 芳 矩	(株)日 立 製 作 所	副 技 師 長
14	八 木 孝 夫	(株)島 津 製 作 所	課 長

◎事務局 東京都港区浜松町1-8-1 株式会社 科学新聞社内

データベース構築小委員会

番号	氏名	所属団体又は会社等名	役職名
1	(委員長) 鈴木 義仁	山梨大学 工学部	教授
2	本間 春雄	日本アナリスト(株) 分析技術研究所	所長
3	及川 紀久雄	新潟薬科大学 環境衛生学部	助教授
4	高井 信治	東京大学 生産技術研究所	助教授
5	金子 忠司	(株)ベルシステム研究所	社長
6	加茂前 長修	安部商事(株)	部長
7	徳田 俊夫	昭和電工(株)	主席研究員
8	後藤 良三	東亜電波工業(株)	主任

科学新聞社	東京都港区浜松町1-8-1	編集長：宮古元俊 担当：佐藤重徳
-------	---------------	---------------------

16. 1. 3 委員会運営概要

次のように、データベース構築のための作業を進めるため委員会を開催した。以下に各委員会の活動状況の報告を開催順序に従って、その議事概要を記載する。

■ データベース構築委員会議事録(第1回)(平成元年8月29日、16:10-17:30)

場 所：東京都品川区西五反田2-6-8 東興ホテル会議室

出席者：鈴木(義)、武藤、本間、及川、鈴木(啓)金子、岡田(代理)、徳田、後藤、高田、八木、各委員及び科学新聞社

経過報告：本委員会を持つことになった経過等について、当事者の科学新聞社社長より挨拶があり、次いでイオンクロマトグラフィー研究懇談会・武藤委員長よりデータベース構築について協力していくことなどを含め、各位に要請された。

本間委員より本委員会はイオンクロマトグラフィー研究懇談会を親委員会とする構築委員会であることの説明と通産省の開発事業となるに至った経過の説明があった。

協議事項：

- (1) 委員の委嘱について、データベース構築委員会名簿(案)について説明があり、藤田委員を八木委員に変更のうえ各委員より承認があった。
- (2) 委員長に鈴木(義)委員とすることを決めた。
- (3) 金子委員より、データベースのソフト開発についての事業予定の説明があった。さらに、内容については次回に検討することとした。データとして集録すべき事項について各委員に検討を依頼した。
- (4) 次回会議日を9月22日(火)、15:00より開催することとした。場所は追って通知する。(葵 荘)
- (5) その他、(次回までに就任承諾書、経歴書を提出のこと)。

■ データベース構築委員会議事録(第2回)(平成元年9月22日、15:10-1730) 場所:港区赤坂1-5-11 葵 荘

出席者:鈴木(義)、武藤、本間、高井、鈴木(啓)、金子、加茂前、徳田、後藤、梶原、高田、八木、各委員及び科学新聞社

第1回会議・議事録を承認した。なお、第2回以降の議事録については科学新聞社(佐藤)が担当することとした。

議 題 (1)

- (1) データベースの構築に当たっての基本方針について(確認)

金子委員より、

- ①データブックのクロマトグラムを基としイメージとして取り込む
- ②システム・データファイルともに当面FD(Floppy Disk)とし、CD(Compact Disk)については今後の課題として併せて検討する、などの内容の確認を願いたい旨の提案があり検討の結果、これを承認した。

- (2) 議題1)に関連して、

クロマトグラムをイメージスキャナで読み込み、データファイル化した場合のクロマトグラムの実際を金子委員に提出を依頼した。

- (3) システムの検索・機構などについて、

データベースの検索ソフトは使用者の便利・容易・簡便さ等をもとに構築するので、キーワードの選定を含め検索のフローチャートを検討することとした。これについては、各委員に10/10日までに、検索方法についての提案を(科学新聞社宛)お願いすることとした。

(4) 小委員会について、

検索の方法等、データベースのソフトを検討するため、小委員会を設けることとし、次の各委員を当てることとした。

鈴木(義)、本間、高井、及川、金子、加茂前、徳田、後藤。なお、小委員会は10/24日(火)15:00、日本アナリスト(株)で開催を決めた。

■ データベース構築小委員会議事録(第1回)(平成元年10月30日(月)12:00より15:20)

場所:東京都品川区西五反田 田原ビル 日本アナリスト(株)

出席委員:鈴木(義)、及川、本間、高井、金子、徳田、後藤、及びベルシステム研究所ならびに科学新聞社の関係者

議題:データベースの基本設計について、

- ① 金子委員より、数種のクロマトグラムのスキャナーによる読み込み、ファイルからのCRT表示の提示があった。

CRTの画面のみでなく、ハードコピーの要望があり、次回に提出することとした。

- ② 金子委員より、検索法について提案があった。また、各委員より提出された検索法キーワードを配布した。これらの案を比較検討し、次回に検索システム(案)の提出を依頼した。

なお、検索の方法を確定するには集積データ内容の詳細が必要で、とりあえず、11月20日までに50-100程度のデータを使用し検索法の作成をするよう依頼した。

- ③ 次回予定:12月15日(金)15:00、日本アナリスト(株)

■ データベース構築小委員会議事録(第2回)(平成元年12月15日(金)15:00より16:30)

場所:東京都品川区西五反田 田原ビル 日本アナリスト(株)

出席者：鈴木（義）、及川、本間、高井、金子、加茂前、徳田、後藤及びベルシステム  
研究所ならびに科学新聞社の関係者

議題：データベースのソフト・検索について、

- ① 金子委員より、具体的なクロマトグラムの取り込み法及びCRT画面表示、ハードコピーの提示があった。
- ② これを基に、意見交換、ソフト内容について研究討議を行った。また、早急に取り込みデータを選定すると共に、データファイル化する作業を行うこととした。
- ③ なお、今年度の構築委員会の報告内容に盛り込む事が出来ように、データ・ブックの編集作業をお願いすることとした。
- ④ 次回に、100-200程度のデータを取り込んだものを基に、最終報告の内容の詰めを平成2年2月28日（水）15：00より行うこととした。

■ データベース構築小委員会議事録（第3回）（平成2年2月28日（水）15：00より17：20）

場 所：東京都品川区西五反田 田原ビル 日本アナリスト（株）

出席者：鈴木（義）、本間、金子、加茂前、徳田、後藤及びベルシステム研究所ならびに科学新聞社関係者

報告事項

- ① 検索キーワードについて、データ提出の各社に再校正をお願いしたことの報告があった。
- ② 前回以後の経過について報告があった。

協議事項

- ① 平成2年3月20日をめどに、最終報告書に記載できる内容の詰めを行った。  
なお、最終報告書内容については委員会で承認を願うこととした。
- ② 金子委員より、構築したデータベースのシステム内容について説明があり、これについてモデルシステムを試用してクロマトグラム読みだし、クロマトグラフィー条件キーワードによる検索、プリントアウトの実演を行った。
- ③ これに関連して、キーワードのメーカー別索引に、No. 98その他を追加する。  
データを取り込みの際の不都合なベースラインについては本間委員に校正を依頼する  
アミノ酸やカタカナ名の試薬等の略号の表記を考慮する等を決めた。

- ④ 小委員会としては、今回のシステム内容を了承し、次回委員会で承認を願うこととし、今年度としては、取り込み100データのファイルを検索用としてシステムとともに提出することを承認し、今年度の作業は終了したこととした。これに関連して、今年度用意したデータ500を早急に取り込む作業を進めること、次年度以降において継続してイオンクロマトグラフィーデータのデータベース化を検討することなどを決めた。
- ⑤ 今年度の最終の委員会を平成2年3月20日(火)14:00より開催の予定とした。

■ データベース構築委員会議事録(第3回)(平成2年3月20日(火)14:10-17:00)

場 所: 東京都中央区銀座8-4-2 日航ホテル 会議室

出席者: 鈴木(義)、本間、金子、加茂前、後藤、梶原、高田、松下(代理)各委員及びベルシステム研究所ならびに科学新聞社関係者

報告事項: 第1回、第2回、第3回データベース構築小委員会の議事内容についての経過報告があった。

議 事

- (1) データベースのシステムについて、委員長より構築小委員会での審議・経過説明と構築内容についての概要と金子委員よりデータベースの検索方法とシステムの特徴についての説明があり了承された。
- (2) 提出されたシステム・データをもとに、クロマトグラムの検索の実演を行った。なお、このデータファイル(FD)を各委員(希望者)に配布し、それぞれ検討した結果を本間委員宛意見として提出を依頼した。
- (3) 編集を終えた約500データの取り込みを今後、継続して行い完成させること、この為の予算措置としてデータベース振興センターに来年度も申請をするが、採択されなかった場合にも科学新聞社が事業として行うことなどを了承した。
- (4) 本システムは



監修：日本分析化学会イオンクロマトグラフィー研究懇談会

編集：イオンクロマトグラフィー・データベース構築委員会

発売：科学新聞社

開発：ベルシステム研究所

とした。

- (5) 本委員会は本年度の業務を終了したので解散するが、データの編集は今後継続が必要なのでイオンクロマトグラフィー研究懇談会内に設置を提案することとし、構築内容等については討論会などの機会に会員に公表することとした。

## 16. 2 データの収集と選択

### 16. 2. 1 オリジナルデータの収集

イオンクロマトグラフィーでは、カラムの種類、性状、分析条件等の違いにより溶離するピークの位置や形状が異なって現れる。

データディスクに採録のデータは、データがそのまま使え（生のデータであり）各社間の相互のクロマトグラムと比較が可能であり、さらに、使用者が測定したデータとの参照が容易であることに配慮している。

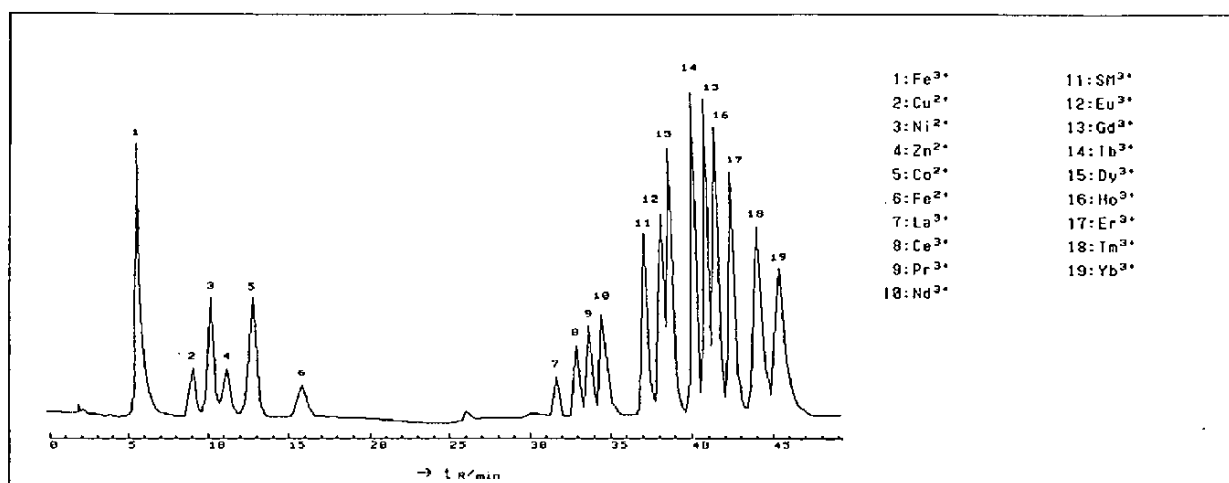
これらの要件を満たすには、

- (1) データの収集に当たって、各メーカー毎にイオンクロマトグラフィーの装置を用いて直接測定したデータのみを採録する。
- (2) カラムや分析条件を統一した記述とする他、試料についての前処理方法などを明確に記載する。
- (3) このためには、データ収集の際に統一した書式に従ってクロマトグラムを記載する。

等の配慮をした。

次の表はデータ採録の際に用いたフォーマットである。このフォーマットにしたがってデータに関する記述内容の統一をはかった。

遷移金属イオン及び希土類イオンの同時分析



<測定条件>

装置 : Dionex 4000i イオンクロマトグラフ  
 カラム : HP1C CS5 (25cm X 4mm I.D.)

溶離液 : グラジエント A: H<sub>2</sub>O, B: 0.006Mピロリジンジカルボン酸 / 0.05M酢酸ナトリウム ほか

溶離液流量 : 1.0 ml/min  
 検出器 : UV/VIS (520nm, 0.5AUFs)  
 試料注入量 : 50 μl  
 カラム温度 : 室温  
 資料提供 : 安部商事㈱

<備考>

反応試薬 PAR

図 クロマトグラム採録のフォーマットの記載例

16. 2. 2 データの選択

データの測定(生データ)については、1989年において、わが国でイオンクロマトグラフィーの装置を市販・製造しているメーカーに協力を依頼し、種々の種類の試料について、広い範囲の分野をカバーしたデータを収集することを目標とした。

収集データは各メーカーによって各々特徴があり、データの評価は各社の自費するものになると予想された。そこで収集データの取舍選択の必要は、当然起きる問題であり、また、データの編集上の修正や再測定と合わせてデータ採否の選定は、イオンクロマトグラフィー研究懇談会のデータブック編集委員会のメンバーと兼任委員に委嘱して行うことを構築委員会で取り決めた。

データを収集に参加したメーカーは次の各社（委員）である。

本 間	春 雄	日本アナリスト（株）
鈴 木	啓 子	理化学研究所 有機分析室
加茂前	長 修	安部商事（株）
松 下	駿	東ソー（株）
徳 田	俊 夫	昭和電工（株）
後 藤	良 三	東亜電波工業（株）
梶 原	久 雄	横河電機（株）
高 田	芳 矩	（株）日立製作所
八 木	孝 夫	（株）島津製作所

### 16. 3. キーワードの選定

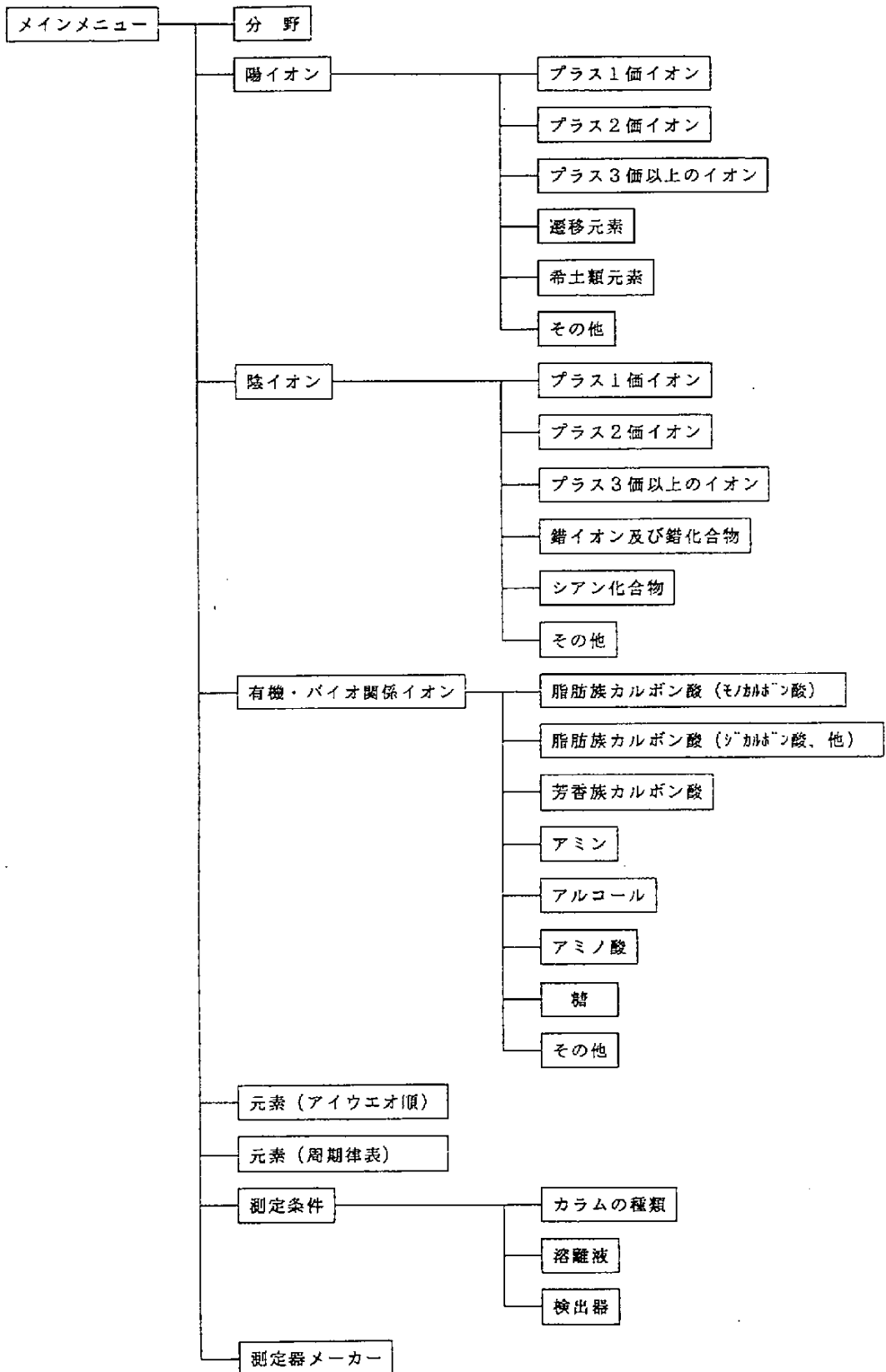
利用者からの検索を容易とするには適切なキーワードを作成することが最も重要である。過去のイオンクロマトグラフィーのデータを分類整理すると共に、委員会審議（第2回構築委員会、第1回、第2回小委員会）を重ねて、データ検索の根幹となるキーワードを作成した。

#### 16. 3. 1 データの分類

キーワードは検索法を考慮し、分類整理した。

各メーカーより収集されるデータを整理するため図3-1に記載する項目によって分類した。この分類表は分野、陽イオン、陰イオン、有機バイオ関係イオンなどの項目（周期律表）、測定条件、測定機器メーカーなどの項目（メインキーワード）で構成され、本データベースの検索法の構築の主要な分類・整理となっている。

検索条件テーブル



各基本項目は索引系統図(図3-1)にしたがって分類されている。1例として陽イオンについて記載する。基本項目陽イオンは次図のように分類され、さらに陽イオン1価、2価、3価以上のイオンの検索用のキーワードが用意されている。

キーワード細目の1例としていかにプラス1価、2価、3価イオンの検索用のキーワードを図3-1、図3-2、図3-3、に記載した。

TB 2 1 <<< 一般(プラス1価イオン) >>>	
001:	Li <sup>+</sup> (リチウム)
002:	Na <sup>+</sup> (ナトリウム)
003:	K <sup>+</sup> (カリウム)
004:	Rb <sup>+</sup> (ルビジウム)
005:	Cs <sup>+</sup> (セシウム)
099:	一般 (プラス1価イオン) すべて

図 3-1

TB 2 2 <<< 一般(プラス2価イオン) >>>	
001:	Be <sup>2+</sup> (ベリリウム)
002:	Mg <sup>2+</sup> (マグネシウム)
003:	Ca <sup>2+</sup> (カルシウム)
004:	Sr <sup>2+</sup> (ストロンチウム)
005:	Ba <sup>2+</sup> (バリウム)
006:	Sn <sup>2+</sup> (スズ)
007:	Pb <sup>2+</sup> (鉛)
008:	Po <sup>2+</sup> (ポロニウム)
099:	一般(プラス1価イオン) すべて

図 3-2

T B 2 3	<<< 一般 (プラス3価以上のイオン) >>>
001:	A l <sup>3+</sup> (アルミニウム)
002:	G a <sup>3+</sup> (ガリウム)
003:	G e <sup>3+</sup> (ゲルマニウム)
004:	I n <sup>3+</sup> (インジウム)
005:	S n <sup>4+</sup> (スズ)
006:	S b <sup>3+</sup> (アンチモン)
007:	S b <sup>5+</sup> (アンチモン)
008:	T l <sup>3+</sup> (タリウム)
009:	B i <sup>3+</sup> (ビスマス)
099:	一般 (プラス3価以上のイオン) すべて

図 3-3

### 16. 3. 2 検出器キーワード

検出器のキーワードとして、図3-4に記載のように、現在使用されている検出器、今後使用される見込みの検出器などを選定し、メーカー別に登録出来るようにした。

T B 7 3	<<< 検 出 器 >>>
001:	電導度検出器 (C D T)
002:	紫外・可視吸光度検出器 (U V / V I S)
003:	電気化学検出器 (E C D)
004:	屈折率検出器 (R I)
005:	蛍光分光光度検出器 (F L D)
006:	その他

図 3-4

### 16. 3. 3 分析法キーワード

イオンは、溶液の性質によってイオン状態が変化する。イオンクロマトグラフィーではイオン状態を変化させて分析することが多い。このため、イオンをどんな状態で分析すべきかを知る事が分析技術者に求められる。本データベースが、この指針となるデータを容易に提供出来るようにすることが重要な課題である。そこで溶離液のpHによってイオンの価数が変わったり、溶離液に対イオンを加えてイオン対を生成させて分離する等の方法等分析モードからの検索が出切るようなキーワードを作成した。その内容を次に示す。

TB70 <<< 測定条件 >>>
001:カラムの種類
002:溶 離 液
003:検 出 器

図 3-5

TB71 <<< カラムの種類 >>>
001:イオン交換
002:イオン排除
003:イオンペア

図 3-6

図3-5は測定条件のキーワードを、図3-6はイオンクロマトグラフィーに使用したカラムの種類キーワードを、図3-7は溶離液についてのキーワードである。

T B 72 <<< 溶 離 液 >>>

- 001:炭酸系
- 002:硫酸系
- 003:硝 酸
- 004:ホウ酸系
- 005:リン酸系
- 006:過塩素酸
- 007:アンモニア
- 008:フタル酸系
- 009:グルコン酸系
- 010:酒石酸系
- 011:p-ヒドロ安息香酸
- 012:p-トルエンスルホン酸
- 013:アセトニトリル
- 014:エチレンジアミン
- 015:シュウ酸
- 016:クエン酸
- 017:乳酸系
- 018:ブチル酸系
- 019:酪酸系
- 020:T B A H

図 3-7

図3-5、図3-6、図3-7のキーワードを順次選定を行うと、どんな状態で分析が実施されたかをクロマトグラムとして知ることが出来る。



### 16. 3. 4 元素別のキーワード

無機化合物は構成元素の種類が多い周期律表や元素名による検索も簡易な実用的な方法と考えられる。検索は周期律表および元素名のアイウエオ順に配列することにした。

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 U	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra																
ランタニド		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
アクチニド		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

図 3-8

TB50 <<< 元素 (アイウエオ順) >>>

1:アインスタイニウム	Einsteinium	Es	65:ネプツニウム	Neptunium	Np
2:アイン 亜鉛	Zinc	Zn	66:ノーベリウム	Nobelium	No
3:アクチニウム	Actinium	Ac	67:ハツキン 白金	Platinum	Pt
4:アスタチン	Astatine	At	68:ハフニウム	Hafnium	Hf
5:アメリシウム	Americium	Am	69:ハークリウム	Berkelium	Bk
6:アルゴン	Argon	Ar	70:バナシウム	Vanadium	V
7:アルミニウム	Aluminium	Al	71:バリウム	Barium	Ba
8:アンチモン	Antimony	Sb	72:パラジウム	Palladium	Pd
9:イットルビウム	Ytterbium	Yb	73:ヒソヒ素	Arsenic	As
10:イットリウム	Yttrium	Y	74:ビスマス	Bismuth	Bi
11:イオウ 硫黄	Sulfur	S	75:フェルミウム	Fermium	Fm
12:イリジウム	Iridium	Ir	76:フッソ フッ素	Fluorine	F
13:インジウム	Indium	In	77:フランシウム	Francium	Fr
14:ウラン	Uranium	U	78:プラセオジウム	Praseodymium	Pr
15:エルビウム	Erbium	Er	79:プルトニウム	Plutonium	Pu
16:エンソ 塩素	Chlorine	Cl	80:プロトアクチニウム	Protactinium	Pa
17:オスミウム	Osmium	Os	81:プロメチウム	Promethium	Pm
18:カドミウム	Cadmium	Cd	82:ヘリウム	Helium	He
19:カリウム	Potassium	K	83:ベリリウム	Beryllium	Be
20:カリホルニウム	Californium	Cf	84:ホウソ ホウ素	Boron	B
21:カルシウム	Calcium	Ca	85:ホルミウム	Holmium	Ho
22:ガドリニウム	Gadolinium	Gd	86:ポロニウム	Polonium	Po
23:ガリウム	Gallium	Ga	87:マグネシウム	Magnesium	Mg
24:キュリウム	Curium	Cm	88:マンガン	Manganese	Mn
25:キセノン	Xenon	Xe	89:メンデレヴィウム	Mendelevium	Md
26:キン 金	Gold(Aurum)	Au	90:モリブデン	Molybdenum	Mo
27:キーン 銀	Silver(Argentum)Ag	Ag	91:ユウロビウム	Europium	Eu
28:クリプトン	Krypton	Kr	92:ヨウソ ヨウ素	Iodine	I
29:クロム	Chromium	Cr	93:ラシウム	Radium	Ra
30:ケイソ ケイ素	Silicon	Si	94:ラドン	Radon	Rn
31:ゲルマニウム	Germanium	Ge	95:ランタン	Lanthanum	La
32:コバルト	Cobalt	Co	96:リチウム	Lithium	Li
33:サマリウム	Samarium	Sm	97:リン	Phosphorus	P
34:サンソ 酸素	Oxygen	O	98:ルテチウム	Lutetium	Lu
35:シュウソ 臭素	Bromine	Br	99:ルテニウム	Ruthenium	Ru
36:シースプロシウム	Dysprosium	Dy	100:ルビジウム	Rubidium	Rb
37:ジルコニウム	Zirconium	Zr	101:レニウム	Rhenium	Re
38:スイキン 水銀	Mercury	Hg	102:ローレンシウム	Lawrencium	Lr
39:スイソ 水素	Hydrogen	H	103:ロシウム	Rhodium	Rh
40:スカンジウム	Scandium	Sc			
41:スズ	Tin(Stannum)	Sn			
42:ストロンチウム	Strontium	Sr			
43:セシウム	Caesium	Cs			
44:セリウム	Cerium	Ce			
45:セレン	Selenium	Se			
46:タリウム	Thallium	Tl			
47:タングステン	Tungsten(Wolfram)W	W			
48:タンソ 炭素	Carbon	C			
49:タンタル	Tantalum	Ta			
50:チッソ 窒素	Nitrogen	N			
51:チタン	Titanium	Ti			
52:ツリウム	Thulium	Tm			
53:テクネチウム	Technetium	Tc			
54:テツ 鉄	Iron(Ferrum)	Fe			
55:テルビウム	Terbium	Tb			
56:テルル	Tellurium	Te			
57:トリウム	Thorium	Th			
58:ドウ 銅	Copper(Cuprum)	Cu			
59:ナトリウム	Sodium	Na			
60:ナマリ 鉛	Lead(Plumbum)	Pb			
61:ニッケル	Nickel	Ni			
62:ニオブ	Niobium	Nb			
63:ネオジウム	Neodymium	Nd			
64:ネオン	Neon	Ne			

### 16. 3. 5 メーカー別

イオンのクロマトグラムでも、使用した装置・方法や測定条件によって保持時間やピーク形状などが異なる。各自の装置で測定されたクロマトグラムと基準のクロマトグラムとの比較の必要性や、他の装置で測定したクロマトグラムとの比較を容易にするためメーカー別の装置をキーワードとして検索に採用し、その装置によるクロマトグラムを検索できるように配慮した。

TB80 <<< 測定器メーカー別 >>>
001:安部商事/Dionex
002:島津製作所
003:昭和電工
004:東亜電波工業
005:東ソー
006:日立製作所
007:横河電機
098:その他のメーカー

図 3-10

## 16.4 検索法の一例

[データ・ベースの検索方法の概要]

データ・ベースの検索の特長とその概要の項目の説明を記載する。操作の流れ図に沿って説明文を記述した。

検索条件のテ  
ーブル  
(1-1)

### 1-1 条件の選択

検索条件を分野、種類別に整理を行ない簡単に索引できるテーブルとして表示する。

テーブル中より条件を簡単に選択することができる。テーブルのひとつとして周期律表からも条件を選択することができる。

検索条件の選  
択、削除  
(1-2)

### 1-2 検 索

検索条件の追加または削除が実行されると、瞬時に検索結果(条件に該当する表題数)が表示される。

検索条件の選択時、その個別の条件での検索を行い該当する表題のない場合は、条件の追加ができないようにしてある。

検索されたサ  
ンプルの  
表題の表示  
(2-1, 2-2)

### 2-1 表題の表示

現在の条件で検索されるグラフの表題が、条件選択テーブルのどこからでも見ることができる。

グラフ、測定  
条件の表示  
(3-1, 3-2)

### 2-2 表題の印刷

検索を行った条件及び検索されたサンプルの表題を印刷することができる。

前処理の表示  
(3-3)

### 3-1 画面の切替

画面(1) グラフと主な測定条件

画面(2) 前処理の方法等

この2つの画面は自由に切り替えることができる。

### 3-2 前後の表題への移動

次の表題、前の表題への移動がファンクションキーのみで瞬時に行うことができる。

### 3-3 グラフの印刷

表題ごとに報告書形式でグラフチャート及び測定条件を印刷することができる。

## [検索法の実際]

データベースの機能の数例として、流れ図に沿って以下にクロマトグラムを引き出すまでの例を示す。

### [操作法] 試料別選択による検索例

データベースのシステムを起動させると最初に次のような画面となる。

#### ①項目メニュー、TBOOメインメニュー

- |                |
|----------------|
| 1:0 分野         |
| 2:0 陽イオン       |
| 3:0 陰イオン       |
| 4:0 有機・バイオのイオン |
| 5:0 元素(アイウエオ順) |
| 6:0 元素(周期律)    |
| 7:0 測定条件       |
| 8:0 測定機器メーカー   |

上の項目メニューをみて、検索するイオンや試料より選択肢を選ぶ。

例えば、3:0 を選択すると次の画面となる。

②TB30 陰イオン

- 1: マイナス1価イオン
- 2: マイナス2価イオン
- 3: マイナス3価イオン
- 4: 錯イオン及び錯化合物
- 5: シアンイオン
- 6: その他
  
- 99: 陰イオンすべて

上のTB30の画面より、マイナス1価イオンを選択し、1:0 を入力すると、次の画面となる。

③TB31 マイナス1価イオン

- 1:  $F^-$  (フッ素)
- 2:  $Cl^-$  (塩素)
- 3:  $Br^-$  (臭素)
- 4:  $I^-$  (ヨウ素)
- 5:  $ClO^-$  (次亜塩素酸)
- 6:  $ClO_2^-$  (亜塩素酸)
- 7:  $ClO_3^-$  (塩素酸)
- 8:  $ClO_4^-$  (過塩素酸)
- 9:  $BrO_3^-$  (臭素酸)
- 10:  $IO_3^-$  (ヨウ素酸)
- 11:  $HCO_3^-$  (炭酸水素)
- 12:  $NO_2^-$  (亜硝酸)
- 13:  $NO_3^-$  (硝酸)
- 14:  $HSiO_3^-$  (ケイ酸水素)
- 15:  $H_2PO_2^-$  (次亜リン酸二水素)
- 16:  $H_2PO_3^-$  (亜リン酸二水素)
- 17:  $H_2PO_4^-$  (リン酸二水素)
- 18:  $HS^-$  (硫化水素)
- 19:  $HSO_4^-$  (硫酸水素)
- 20:  $BF_4^-$  (四フッ化ホウ素)

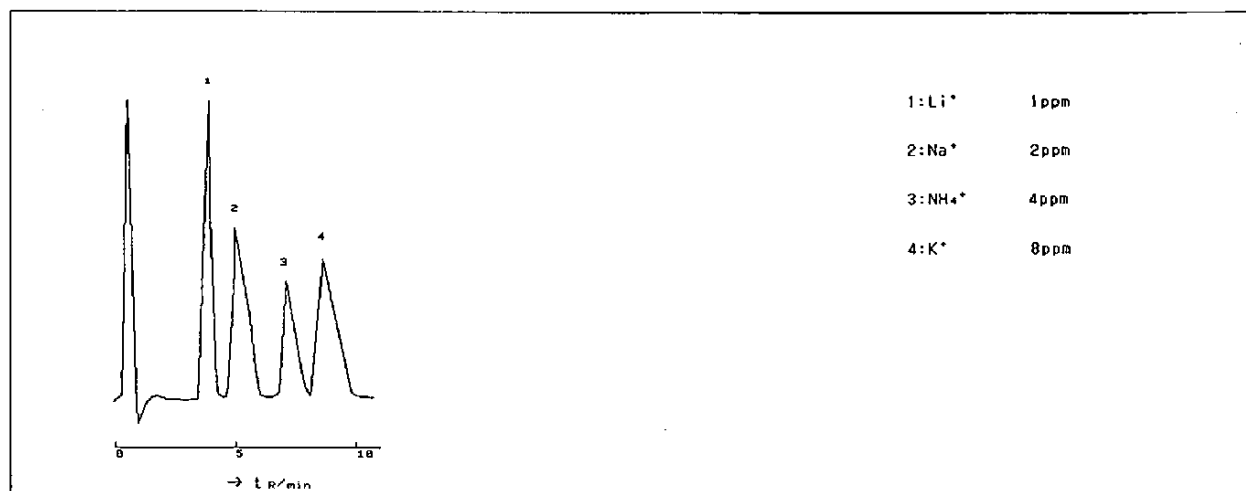
ここで 2: 塩素を選択すると塩素の分析項目のタイトル覧が画面上に表示される。

表 題	
1:	2-01 8種類の無機陰イオンの分析
2:	2-02 6種類の無機陰イオンの分析
3:	2-03 強疎水性溶液中の無機陰イオンの分析

カーソルで表題より、8種類の無機陰イオンの分析を選択し、キーで入力する。次のクロマトグラムの画面となる。

#### ④クロマトグラム

##### 3.11 1価陽イオンの分析



#### [操作法] 分野別による検索例

このクロマトグラムは、分野別にしながら検索する方法でも容易に得られる。即ち、先ずT B 0 0メインメニューで分野を選択し、次いで画面T B 1 0標準溶液をキーで入力し、表題を表示させると次の画面となる。

#### 検 索 条 件

1: C 1<sup>-</sup> (塩素)

2: 標準溶液

#### 表 題

1: 2-01 8種類の無機陰イオンの分析

2: 2-02 6種類の無機陰イオンの分析

3: 2-03 強疎水性溶液中の無機陰イオンの分析

この画面より、1: をキーで入力すると、上のクロマトグラムが画面に表示される。



### 〔操作法〕 周期律表より検索法

T B O Oメインメニューより、5:または 6: の周期律表を選択する。例えば 6: を選択し、入力する。画面はP 1 7の周期律表が表示される。

ここで、塩素を選択し、その原子番号17をキーで入力した後、表題を入力すると次の画面が表示される。

表 題	
1: 2・01	8種類の無機陰イオンの分析
2: 2・02	6種類の無機陰イオンの分析
3: 2・03	強疎水性溶液中の無機陰イオンの分析

この画面は、〔試料別検索法〕や〔分野別検索法〕の画面と同一である。

このように、本データベースの内容は、試料別検索のみでなく、多種の検索法が効果的、機能的に組合わされており、初心者から、上級者、大学生、大学院生に至る幅広い使用層を想定して、検索に対応できるよう工夫、構築したものである。

## 16.5 本研究による波及効果と今後の課題

予想される効果として、次の事項が挙げられる。

- (1) イオンクロマトグラフィーのデータベースは、イオンクロマトグラフィーを利用している分析技術者に、分析法と分析条件の選択、ピークの同定およびクロマトグラムの比較など支援のための辞書機能を持っている。
- (2) データベースは、標準化された分析化学的情報であるから、これを利用することにより分析技術者の技術水準の向上が期待される。
- (3) データベースは、大学、専門学校など各種教育機関における分析化学的教材として、広い利用範囲が考えられる。
- (4) データベースは、他の分野の分析技術者にとっても利用し易くなることから、分析化学全般の学術的向上が期待される。
- (5) 各ユーザーは、これまでは自社で購入した機種に関する情報は入手し易いが、他の機種に関する分析化学的情報の入手が困難であったが、データベースの構築により、自分で使用していない機種の資料の入手が可能になる。

### 16.5.1 今後の課題

イオンクロマトグラフィーによって報告されるデータはより多彩に、また多種のデータが測定される見込みであり、今後更にデータの選定作業を継続して行い、最新のデータベースの機能を果たす必要がある。

イオンクロマトグラフィーの普及・利用は広い分野に拡大していくものと予想される。従ってこれらの分野に利用されることを側面より促進するものとして、新しいデータの取り込みなどデータベースの担う役割は重大である。

データは絶えず進歩しており、データベースとしては信頼性が高く、技術水準の向上にも役立つような学術的な内容が要求されるであろう。

今回収集したデータは、いずれもオリジナルデータであり、さらにデータの収集・採録作業を継続するよう配慮されるべきと考えている。

## 付 録

本報告書に記載のデータベースシステム（フロッピーディスク）の使用説明書を添付した。

# 操 作 説 明 書

## 1. 検索条件の選択・削除

検索条件の最大設定数は10件です。

### ファンクションキーの説明

例えば f・2      メニュー……………条件メニュー……………

f・2	メニュー	条件メニューテーブルを前へ戻す
f・3	表題	検索された表題を表示する
f・6	次頁	メニューテーブルが次へ進む
f・7	前頁	メニューテーブルが前へ戻る
f・10	終了	データベースを終了する

### (1) メニューテーブル

添付のメニューテーブル表を参照してください。

[ ] のついた条件は次ぎのテーブル名です。

### (2) 条件の選択

①番号を入力する	例	2	
②確認を行なう		標準溶液	[Yes/No]
	例	Y ( y )    または	N ( n )
Yes	条件を選択する		
No	条件を選択しない		

### (3) 条件の削除

現在設定されている条件を再設定すると、条件が削除されます。

①番号を入力する	例	2		
②確認を行なう		標準溶液		削除しますか [Yes/No]
	例	Y ( y )	または	N ( n )

Yes 条件を削除する

No 条件を削除しない

条件が選択されると、左側の検索条件テーブルに条件が追加されます。

条件が削除されると、左側の検索条件テーブルから条件が消去されます。

選択された条件に該当するサンプルが0件である時は

条件に該当するサンプルがありません。 [ No ] を押してください。

と、メッセージを表示し、条件の設定ができません。

## 2. データベースの検索、表題の表示

### (1) データベースの検索

条件の追加または消去が行われると、データベースの検索をおこない

条件に該当する表題数を表示します。

ただし、検索された表題数が 60 件以上ある場合には

検索された表題数が多過ぎます。

検索条件を追加してください。

と、メッセージを表示します。

## (2) 検索された表題の表示

(検索条件設定が面から f・3 表題を押すと表示します)

### ファンクションキーの説明

f・2	条件	条件設定画面へ戻る
f・3	グラフ	グラフ、測定条件等を表示する
f・6	次頁	表題が次のページへ進む
f・7	前頁	表題が前のページへ戻る
f・9	印刷	設定した条件及び検索された表題を印刷する

## (3) グラフ、測定条件等の表示

(表題表示から番号入力または f・4 グラフ を押すと表示します)

### ファンクションキーの説明

f・3	表題	表題表示の画面に戻る
f・6	次頁	次の表題のグラフを表示する
f・7	前頁	前の表題のグラフを表示する
f・8	画面	(1) グラフ画面 ↔ (2) 前処理等の画面の切替を行なう
f・9	印刷	グラフ、測定条件等を印刷する
f・10	終了	グラフ表示を終了し、表題表示画面へ戻る

印刷 現在表示されている表題のグラフ、測定条件等を報告書の形式で印刷します

————— 禁無断転載 —————

平成2年3月発行

発行 財団法人 データベース振興センター

東京都港区浜松町二丁目4番1号  
世界貿易センタービル7階  
TEL 03-459-8581

委託先 株式会社 科学新聞社  
東京都港区浜松町一丁目8番1号  
TEL (03) 434-3741(代)

印刷所 株式会社 理想社印刷所  
東京都新宿区改代町24番地  
TEL (03) 260-6177(代)

