

異物解析プログラムのご紹介

Introduction of Contaminant Analysis program

新しいフーリエ変換赤外分光光度計IRAffinity-1の発売に伴いバージョンアップしたIRsolution Ver1.40には、新しく「異物解析プログラム（特許出願中）」を標準搭載いたしました。このプログラムでは未知試料に対し主成分だけでなく、スペクトルに現れている副成分に関する

情報も得ることができます。このため、赤外分光分析の経験が浅い方にとって最も難しいといえるスペクトルの同定・定性に役立つツールとなっています。今回はこの「異物解析プログラム」をご紹介します。

T.Tsuchibuchi

スペクトル検索

Spectrum Search

異物分析でよく用いられる手法にスペクトル検索（ライブラリー検索）があります。これはFTIRのソフトウェアにある検索機能や検索用のソフトウェアを用いて、測定した異物のスペクトルをハードディスクにインストールしたスペクトルライブラリーと比較するものです。比較結果をスコアと呼ばれる類似度を示す点数にし、スコアの高いものをリストアップします（ヒットリスト）。スペクトル検索はライブラリーに収録された数多くのスペクトルから異物のスペクトルに類似したスペクトルを探し出すことができるため大変便利な機能です。

しかし、異物と同じ物質がライブラリー中にあれば良好な結果が得られるものの、同様のものがライブラリー中になくてもヒットリストは表示されます。また、市販

されているライブラリーの多くが1成分ごとの純粋な試料のスペクトルなのに対し、異物は混合物であることも多々あります。混合した異物のスペクトルと純粋な1成分のスペクトルとを比較すれば当然スコアは下がるため、たとえライブラリー中に異物の主成分が収録されていてもヒットリスト1位になるとは限りません。

従って、ヒットリストの中から異物と類似したスペクトルを探し出す必要があります。

更に、混合している第2、第3の副成分に関しては、主成分と同時にヒットする可能性は低く、差スペクトルなどの処理なしには情報は得られません。このように異物分析の場合には、単純にスペクトル検索から正しい解答が得られないという難しさがあります。

異物解析プログラム

Contaminant Analysis program

異物解析プログラムはスペクトル検索とピーク照合による判定機能をあわせた新しい解析手法で、主成分の定性だけでなくスペクトルに表れた微小な特徴ピークから副成分に関してもその含有の可能性を示してくれます。

本プログラムには異物としてよく検出される成分を元に300以上のポリマー、有機物、無機物のスペクトルを搭載しており、これを元に異物の解析を行ないます。

解析例

Analytical Result

本プログラムの解析例をFig.1, 2に示します。異物スペクトルのファイルと測定方法を指定すると解析が行われ、Fig.1に示すような解析結果が表示されます。上段に主成分、下段に副成分の解析結果が表示されます。成分名の左にある(++)などのマークは解析の結果を表しており、+マークの多い順(最大3)に可能性の高いことを示しています。

解析結果の各成分をクリックすることで異物のスペクトルと比較することもできます。Fig.2は異物のスペクトルと主成分および副成分で(+++)であったポリ塩化ビニル(軟質)と炭酸カルシウム(CaCO_3)、水酸化アルミニウム($\text{Al}(\text{OH})_3$)のスペクトルを重ねて表示した画面です。解析結果から異物はこれらの混合物であると考えられます。

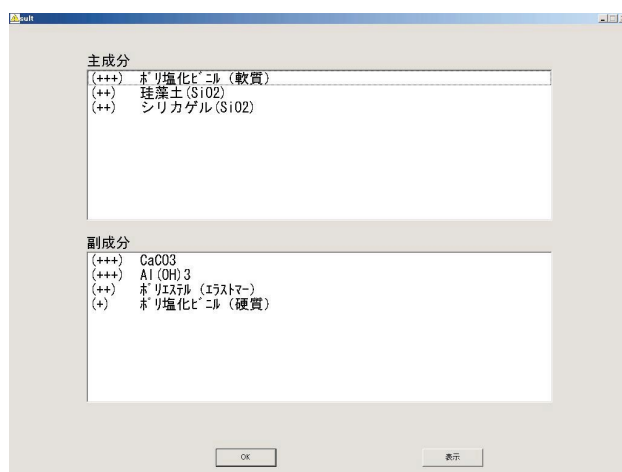


Fig.1 解析結果1
Analytical Result1

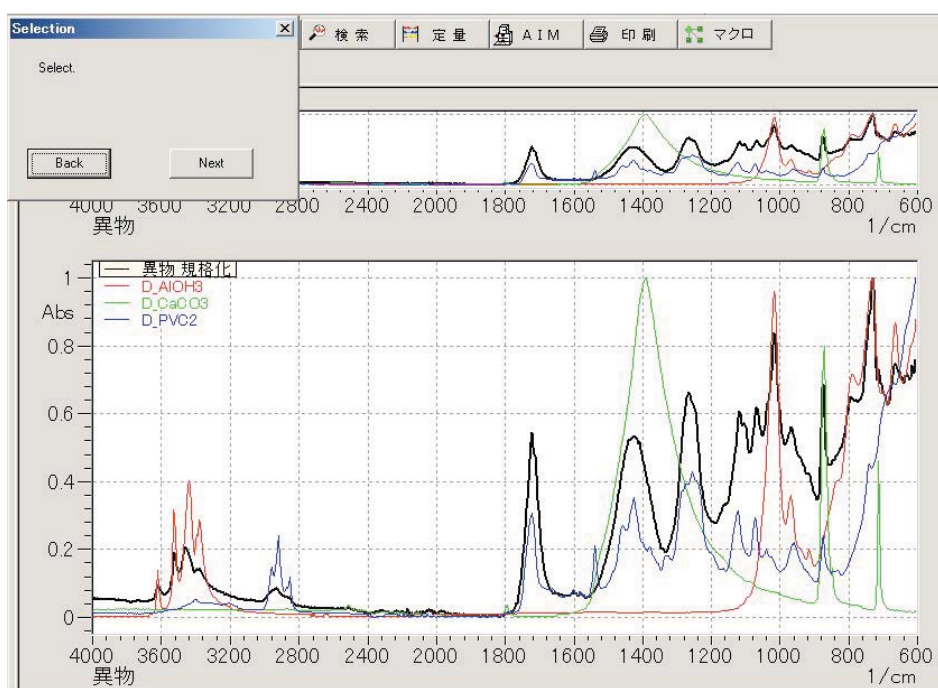


Fig.2 解析結果2
黒:異物 青:PVC 赤: $\text{Al}(\text{OH})_3$ 緑: CaCO_3
Analytical Result2

初版発行：2008年3月

島津製作所 分析計測事業部
応用技術部

島津分析コールセンター

☎0120-131691(携帯電話不可)
●携帯電話専用番号(075)813-1691

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。改訂版は右に示す島津WEBで閲覧できます。

会員情報提供サービス「Shim-Solutions Club」にご登録下さい。
<http://solutions.shimadzu.co.jp/>
いろいろな情報提供サービスが受けられます。

3100-03802-660-1K
2008.3