SHIMADZU
Excellence in Science

Application News

フーリエ変換赤外分光光度計　IRXross™
赤外顕微鏡　AIMsight™
赤外ラマン顕微鏡　AIRsight™

様々なプラスチックの分析事例 ー KnowItAllバンドルの有効性 ー

岩﨑 祥子

ユーザーベネフィット

- ◆ マイクロプラスチックやリサイクルプラスチックの組成を把握するために、FTIRは簡便かつ有用な分析機器です。
- ◆ データベース検索ソフトウェアKnowItAllを用いることで、混合物の多成分検索や指定したピークの官能基解析が行えます。
- ◆ オプションのKnowItAllバンドルを使用すると、FTIR制御ソフトウェアからワンクリックでデータをKnowItAllソフトウェアに自動転送し、素早くスペクトル解析を行うことができます。

■はじめに

わたしたちの身の回りには多種多様なプラスチック製品があります。プラスチックは軽くて丈夫で加工しやすいという利点がある一方で、世界中で様々な問題を引き起こしています。マイクロプラスチックやリサイクルプラスチックの課題について日々研究が進められている中で、まずプラスチックの材質を把握することは重要です。プラスチックの分析には様々な分析機器が用いられており、その中でもフーリエ変換赤外分光光度計（FTIR）は溶媒に溶解させるなどの複雑な前処理を必要とせず、簡便に分析できる機器として広く利用されています。

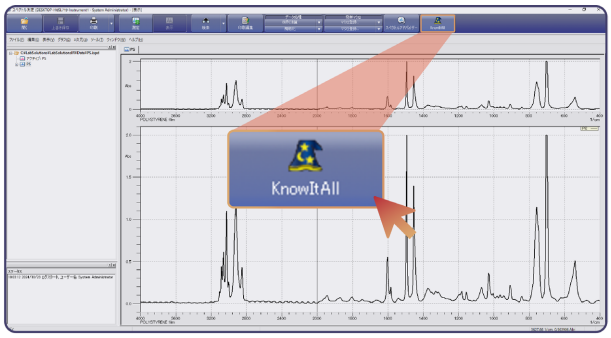
今回は、John Wiley & Sons, Inc. 製 KnowItAllを活用した、プラスチックの分析事例を紹介します。KnowItAllでは、豊富なライブラリを用いた検索、多成分検索による構成成分と構成比率の解析、指定したピークの官能基検索（部分構造解析）など、様々な解析が行えます。また、当社FTIR用ソフトウェアLabSolutions™ IRおよび赤外顕微鏡ソフトウェアAMsolutionにはオプションのKnowItAllバンドルがあり、ソフトウェア内に配置されたKnowItAllボタンをクリックすると、アクティブなスペクトルデータがKnowItAllソフトウェアに自動転送され、素早く解析することが可能となります。

■赤外スペクトルの解析

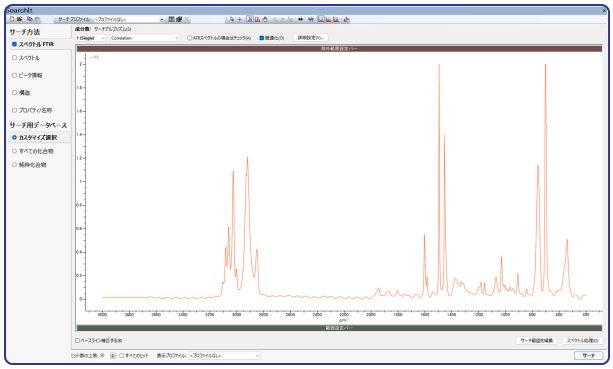
FTIRで取得したスペクトルを解析する際、近年では解析に使用するデータベース数の増加や検索ソフトウェアのアルゴリズム改良、操作性の向上により、誰でも簡単に赤外スペクトルの検索を行い、瞬時にPC画面上に結果を表示することができるようになりました。しかし、スペクトル検索しても、データベース内のスペクトルと完全に一致する物質が見つからない、もしくは、類似した結果が得られても、一部に異なるピークがあり、その解釈に行き詰まることがあります。このような場合には差スペクトルの活用をおすすめしており、FTIR TALK LETTER Vol.22で詳しくご紹介しました。また、LabSolutions IRやAMsolutionの標準機能であるスペクトル検索の使い方のコツについて、FTIR TALK LETTER Vol.24、25、26でご紹介しました。

これに加えて、多成分検索を自動で行いたい、もしくはピークの官能基検索を行いたいという場合は、図1に示すKnowItAllバンドルがおすすめです。赤外スペクトルを取得後、KnowItAllのボタンをクリックすると、LabSolutions IRもしくはAMsolution上でアクティブなスペクトルがKnowItAllのSearchIt画面に自動で転送されます。 SearchItやID Expertは、赤外スペクトルとの単純な一致度の比較ができるだけなく、SearchItのMixture Analysisでは、成分数を選択することにより混合物を解析したり、ID Expertでは、検索の際に読み込んだ赤外スペクトルの質も判定することが可能です。さらに、官能基検索のためのAnalyzeItでは、特定のピークをクリックするだけで、その位置にピークを持つすべての官能基を一覧表示します。

なお、ここには示しませんが、ラマンスペクトルについても、赤外スペクトルと同様の解析・評価が可能です。



LabSolutions IRの「KnowItAll」ボタンをクリック



KnowItAllのSearchIt（標準的なスペクトル解析機能）へデータを自動転送

KnowItAllに搭載されている主な機能
- 混合物解析 Mixture Analysis
- スペクトル解析 ID Expert
- 官能基解析 AnalyzeIt
- スペクトルデータベースの構築
- レポート作成

など

図1　KnowItAllバンドル（LabSolutions IRとの連携例）

■使用装置と測定条件

フーリエ変換赤外分光光度計IRXrossの試料室に、1回反射型ATR付属品QATR™ 10を取り付けたシステムを用いました。装置の外観を図2に、測定条件を表1に示します。

図2　IRXross™とQATR™ 10の外観

表１　測定条件

装置	: IRXross、QATR 10（ダイヤモンド）
分解	: 4 cm^{-1}
積算回数	: 45回
アポダイズ関数	: SqrTriangle
検出器	: DLATGS

■マイクロプラスチックの分析―官能基解析

マイクロプラスチックによる河川や海洋の汚染は世界規模で広がっており、生物への影響も懸念されています。近年では世界各国におけるマイクロプラスチックの分布状況などの科学的知見を得るため、モニタリング調査や研究が盛んに行われています。ここでは、マイクロプラスチックを1回反射ATR法で分析しました。得られた赤外スペクトルとライブラリによる検索結果を図3に示します。島津標準ライブラリより、ポリプロピレン（PP）であることがわかりました。しかし、3600～3100 cm^{-1}や1700 cm^{-1}付近、1300～1000 cm^{-1}付近の波数領域でピークが一致していません。そこで、KnowItAllバンドルを用いて、Analyzeltによるピークの官能基検索を行いました。まず、PPのピークの帰属を確認した結果を図4に示します。官能基解析により、官能基やピーク範囲、ピーク強度や振動モードに関する情報を把握することができます。予想されるピーク位置がスペクトル上に表示されるため、ピークの相違について簡単に確認できます。続いて、PPと一致しなかったピークをそれぞれ選択し、照合した結果を図5に示しました。3600～3100 cm^{-1}はO-H基、1700 cm^{-1}付近と1300～1000 cm^{-1}付近はそれぞれC=O基、C-O基由来のピークと推測され、いずれもPPの構造に存在しない官能基であることから、PPが変性（劣化）して赤外スペクトルのパターンが変化したのではないかと考えられます。

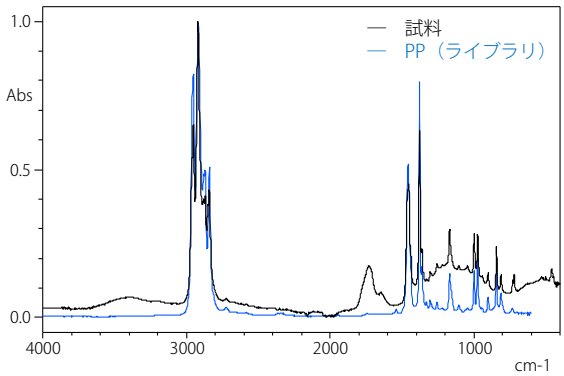


図３　標準ライブラリによる検索結果

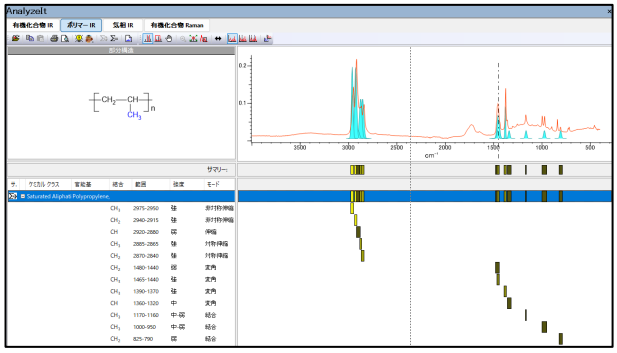


図４　KnowItAllバンドル：官能基解析の結果（PP）

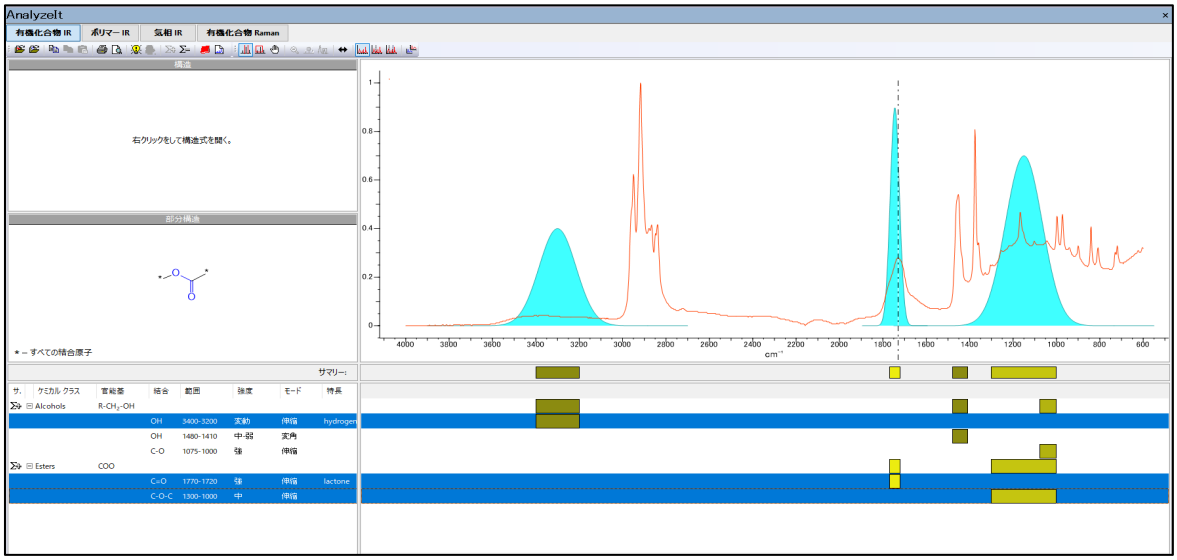


図５　KnowItAllバンドル：官能基解析の結果（PPと一致しなかったピーク）

なお、当社には、紫外線劣化したプラスチックの赤外スペクトルを収録した島津オリジナルライブラリ（紫外線劣化プラスチックライブラリ）があります。このライブラリには、14種類のプラスチックについて、岩崎電気株式会社製 超促進耐候性試験装置を使用し、最長550時間（約10年分の紫外線暴露量に相当）紫外線を照射した試料の赤外スペクトルが含まれています。マイクロプラスチック分析に効果を発揮することから、このライブラリを用いて検索を行いました。得られた検索結果を図6に示します。この結果、紫外線を150時間照射したPPの赤外スペクトルと取得した赤外スペクトルが類似していることから、試料は劣化したPPであることがわかりました。

島津オリジナルライブラリを使用することにより、分析者を問わず、簡単にマイクロプラスチックを解析できます。

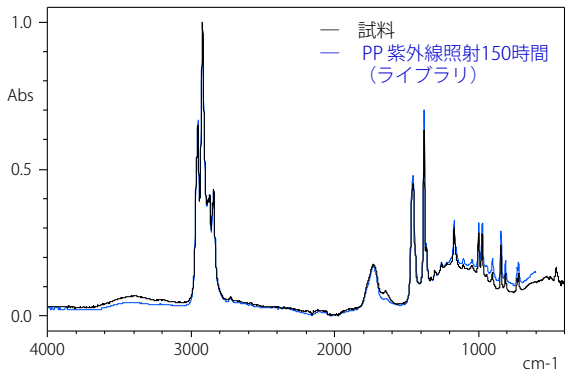


図６　紫外線劣化プラスチックライブラリによる検索結果

■リサイクルプラスチックの分析―多成分解析

リサイクルプラスチックは単一成分ではなく、複合材料であることもあり、2種類以上の成分が含まれる赤外スペクトルの解析は複雑になる場合があります。例えば、ポリカーボネート（PC）／アクリロニトリルブタジエンスチレン（ABS）樹脂は、PC樹脂とABS樹脂のそれぞれの長所を兼ね備えた樹脂です。耐衝撃性、耐熱性、成形加工性を有し自動車内装部品、事務用機器に使用され、また、絶縁材としても優れていることから電気部品などにも幅広く使用されています。

PC/ABS樹脂のリサイクル材を1回反射ATR法で分析し、KnowItAllバンドルを用いて、ID Expertによる解析を行いました。図7に示す通り、ID Expertを使用すると、単一成分から複数成分までのライブラリ検索結果を自動で表示します。また、複数成分の場合、ヒットしたライブラリスペクトルの合成スペクトルを作成し、実データとの残渣スペクトルを表示します。さらに、SearchItによる解析では算出されない、ピークサーチや官能基解析結果も紐づきます。

なお、ID Expertではスペクトルの最適なフィッティングを行うことで、PCと ABSの比率（0.38：0.62）を算出することも可能です。

ただし、この比率は物質のモル吸光係数などは考慮されておらず、単純に赤外スペクトルの面積比から算出されているため、実際の比率（PC：ABS=0.25：0.75）とは異なり、取り扱いには注意が必要です。

その他、ID Expertには、赤外スペクトルのノイズ（S/Nの推定値）や汚染（大気中の水蒸気や二酸化炭素を汚染と定義）の有無などを自動判別＊し、ワンクリックで簡便にデータ処理を行い、再検索を実行する機能も備えています。

＊ノイズが多い場合や汚染がある場合、図7に挿入した「状況」部分のチェックマークが変化し、赤色もしくは黄色で表示されます。

■まとめ

FTIRに1回反射ATR付属品を組み合わせたシステムを使用することで、様々なプラスチックを簡便に測定できます。また、上記システムで取得したデータを解析する際、ソフトウェアによって解析された結果が正しいものかどうか判断するのは分析者であり、この判断のためには、未だに多くの知識や経験を必要とします。しかし、今回ご紹介したKnowItAllバンドルでは、指定したピークの官能基解析や多成分解析を簡便に実施することができ、解析精度の向上のための有用な手段となります。

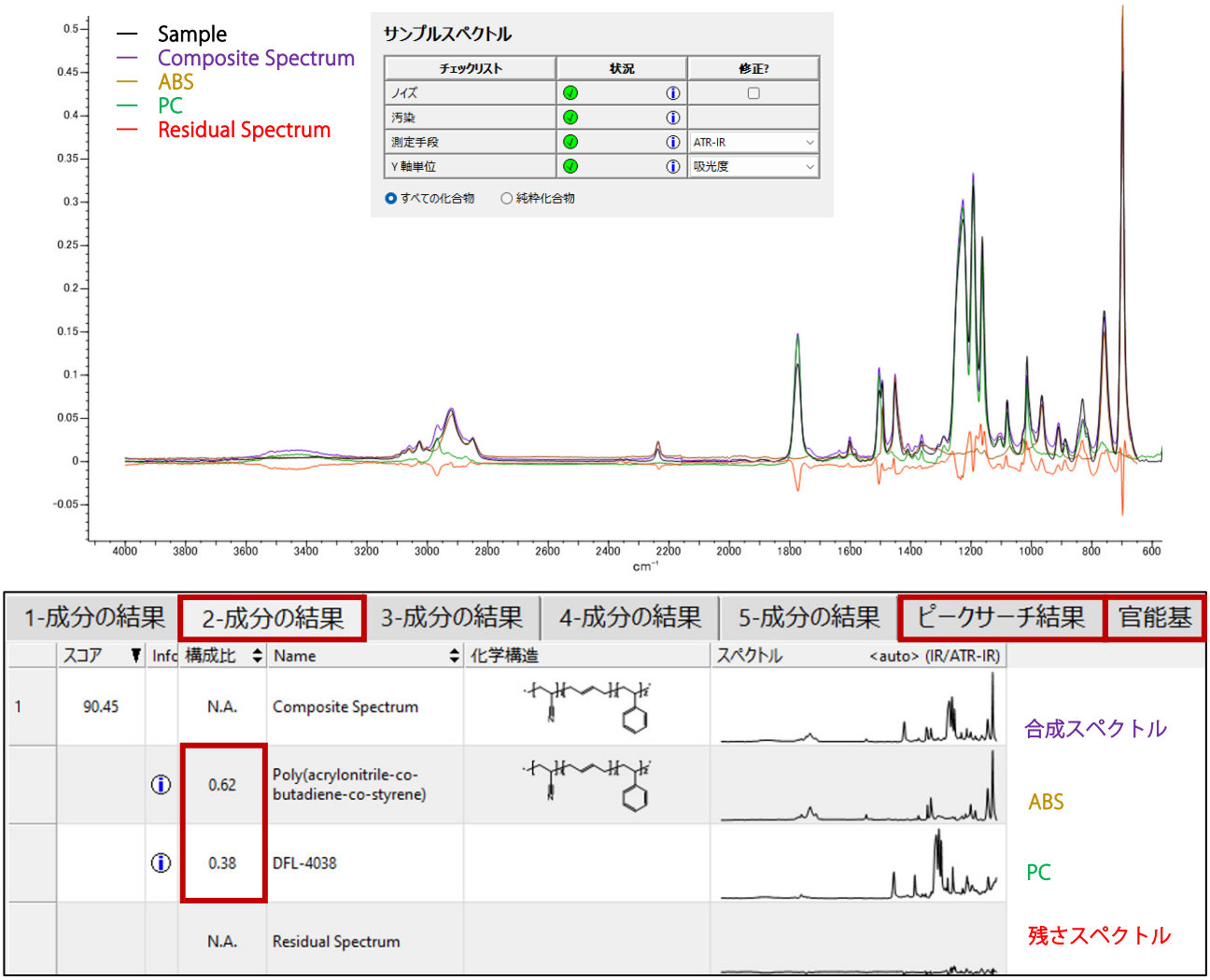


図 7　KnowItAllバンドル：IDExpertの検索結果

LabSolutions、IRXross、AIMsight、AIRsightおよびQATRは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。
KnowItAllは米国、英国、EU、中国におけるJohn Wiley & Sons, Inc.の登録商標です。

株式会社 島津製作所　分析計測事業部
https://www.an.shimadzu.co.jp/

01-00824-JP　初版発行：2025年 1月

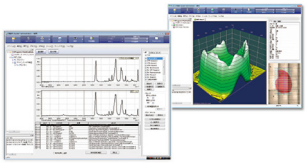
島津コールセンター　0120-131691

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。
本文中に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。
本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

© Shimadzu Corporation, 2025

アンケート

関連製品 一部の製品は新しいモデルにアップデートされている場合があります。



LabSolutions™ IR
フーリエ変換赤外分光光度計用データシステム

AIMsight
赤外顕微鏡

AIRsight™
赤外ラマン顕微鏡

関連分野

- 環境
- マイクロプラスチック
- 化学
- プラスチック-化学

- 価格お問い合わせ
- 製品お問い合わせ
- 技術お問い合わせ
- その他お問い合わせ