





のどかな秋の京都、古都の町並み。紅葉を求めて国内外から多くの観光客が訪れる。

赤外分光イメージングの生物計測への応用とその進展 …… P.2 スペクトルアドバイザー機能について …… P.5 赤外スペクトル解析のポイント – 脂肪族不飽和炭化水素 (オレフィン)・芳香族編 – …… P.8 マイクロプラスチック (MPs) の多角的な分析評価に対応するラインナップ …… P.16







大阪大学大学院基礎工学研究科 システム創成専攻 電子光科学領域 助教 加藤 遼

1. はじめに

動物細胞や微生物の生態、またそれらが関連する数多くの 生命現象を理解する上で、光を用いる光学顕微イメージング 技術は重要な役割をこれまで果たしてきた。17世紀に光学 顕微鏡が発明されて以降、生物の形態やダイナミクスを観察 し、生命科学の発展に繋がってきた。蛍光顕微鏡の登場によ り、形態だけでなく、生物内の分子・オルガネラの分布を可 視化できるようになり、生命科学が発展したと共に、生物内 の分子イメージングの重要性を強調することにもなった。近 年では、ラマン分光を用いた非染色分子イメージング技術も 発達し、前処理なしで生物内の分子分布や分子の化学構造 に基づく物性情報を高解像度で可視化することができる。そ のため、動物細胞やバクテリア、バイオフィルムの組成分析 に広く応用されている。

一方で、ラマン散乱光は微弱な光信号であるため、十分な 視野と解像度を確保した顕微イメージングには数時間を要 する。それゆえ、生物のダイナミクスの観察は難しい。また、 自家蛍光が強い藍藻などの試料では、微弱なラマン散乱が 自家蛍光に埋もれ、その計測が難しい。その点、赤外吸収分 光は、ラマン分光に比べ感度が3桁以上も高いため、高速イ メージングが可能であることや、中赤外域の光信号を計測す るため、可視域の自家蛍光の影響を受けない利点がある。ま た、振動分光学的に重要な差は、生体内の分子の極性型の 分子振動を観察できる点である。生物内に存在する生体分 子には、それぞれ特有の極性型の分子振動を示す官能基・ 分子構造がいくつか存在する。例えば、脂質のカルボニル基 やタンパク質のアミド結合、多糖の骨格構造などである。こ れらの極性型の分子振動は、周囲もしくは分子全体の構造変 化に鋭敏であるため、これらの信号を計測することで、それ ぞれの分子を可視化することや、タンパク質の2次構造や官 能基の変化などの分子情報も解析できる。しかし、顕微鏡の 空間分解能は用いる光の波長で決まるため、フーリエ変換型 赤外分光 (FTIR) をベースとした赤外顕微鏡の空間分解能は 20 µm 程度に制限される。細胞内の分子構造体の観察には、 少なくともサブマイクロメートル程度の空間分解能が必要で ある。

2. 超解像中赤外分光イメージング

そこで我々は、近年開発した超解像中赤外分光イメージ ング技術の生物計測応用を進めている「1」。先ほど述べた が、顕微鏡の空間分解能は、主に信号を読み取る際に使用 する光の波長によって制限される。中赤外フォトサーマル 顕微鏡は、ナノ秒パルスの中赤外レーザーを試料に照射し、 分子の赤外吸収によって生じる光熱効果(試料の屈折率・ 体積の瞬間的な変化)を可視光で検出する技術である(図 1左)。可視光の反射光や透過光の強度および進行方向は、 熱レンズ効果やMie 理論に基づいて赤外吸収による光熱 変換に依存する。したがって、ロックイン検出などの手法を 用いてこれらの微小な変化を読み取ることで、間接的に分 子の赤外吸収情報を取得できる。この手法により、蛍光や ラマン顕微鏡と同等の高い空間分解能で赤外吸収情報を 分析できる。我々のグループを含む国内外の数グループは、 独自に中赤外フォトサーマル顕微鏡を開発してきた^[2-5]。図 1中は、従来のFTIR赤外顕微鏡で取得した直径3.5 μmの ポリマー粒子の赤外吸収画像と、我々の中赤外フォトサー マル顕微鏡で取得した直径0.5 μmのポリマー粒子の赤外 強度画像を示している。どちらの画像も、ポリスチレンの芳 香環 環伸縮モードの強度(波数1494 cm⁻¹)で可視化され ている。中赤外フォトサーマル顕微鏡では、サブミクロンサ イズの微小物体でも可視化でき、従来の方法と比較して空 間分解能が10倍以上向上していることが、それぞれの強度 ラインプロファイルからも確認できる。

中赤外フォトサーマル計測においては、FTIRスペクトル を再現できるかという議論がある。図1右は、ポリスチレン のFTIR・中赤外フォトサーマルスペクトルである。中赤外 フォトサーマル計測では、赤外パルス光の波長を掃引しな がら可視光の応答を計測することでスペクトルを得る。図 の2つのスペクトルの特徴がよく一致している。スペクトル 形状の違いは、フォトサーマル計測では量子カスケード レーザーを光源として使用しているため、レーザーの偏光 特性や強度特性がスペクトルに反映されているものと考え られる。



 図1 (左)中赤外フォトサーマル計測(中赤外光熱変換計測)の概要
(中)中赤外フォトサーマル顕微鏡を用いたサブミクロン赤外吸収イメージングの原理実証。
従来法と中赤外フォトサーマル顕微鏡で撮像されたポリマービーズの赤外吸収像の比較。
(右)フーリエ赤外分光法(FTIR)と中赤外フォトサーマル計測で取得したポリスチレンの 赤外吸収スペクトルの比較。文献1より転用。

3. バイオフィルムの分子イメージング

中赤外フォトサーマル顕微鏡は、空間分解能の高さに加 え、もう一つの重要な利点がある。それは、試料の蛍光が 赤外吸収信号と相互干渉しないため、2つを共立化できる ことである。試料からの反射光や散乱光を蛍光フィルターで 分光することで、蛍光信号と可視光の応答から読み出した 中赤外吸収信号を個別に検出することが可能である。この 特徴により、蛍光標識された試料や強い自家蛍光を持つ試 料に対して、蛍光および赤外分光イメージングを同時に行 うことができる。実際の応用例として、光合成微生物である 藍藻と藍藻が細胞外に生成する多糖を主成分とするマト リックス構造のイメージング分析を行なった。自家蛍光を利 用して藍藻を観察し、藍藻が生成する硫酸多糖の特定振動 モードを用いてイメージングを行い、試料内の各成分の分 布を可視化した^[6]。図2左に、藍藻と硫酸多糖の赤外吸収 スペクトルを示した。硫酸多糖に含まれる硫酸基は、主にタ ンパク質で構成されるバクテリアとは異なる独自の赤外吸 収信号を示す。この特異な波数領域を用いることで、硫酸 多糖の可視化が実現できる。図2中、右には、透明基板上 に作製された藍藻バイオフィルム試料の明視野画像、硫酸

多糖の赤外吸収信号強度、およびバクテリアの自家蛍光強 度が示されている。このマルチモーダルイメージングの結 果、バイオフィルム内で藍藻と硫酸多糖が明確に可視化で きた。この観察から、バイオフィルム内の硫酸多糖が繊維 状の構造を形成し、その構造に沿って藍藻細胞が整列して いることが判明した。しかし、他の領域をイメージングした 結果では、藍藻細胞が必ずしも繊維状構造に沿って並んで いるわけではないことも確認された。

従来の説では、バイオフィルムはブルーム状に形成され ると考えられており、実際にマクロレベルでの観察でもブ ルーム状の形成が確認されていた。硫酸多糖の集合体が形 成された後、培養液中で藍藻細胞がこれに結合し、気泡の 浮力により自然に集まって密集したバイオフィルムが形成さ れると考えられてきた。今回のイメージング結果は、この予 測が正しいことを示唆していると我々は考察している。今回 は特に藍藻の硫酸多糖に焦点を当てて解析を行ったが、今 後はバイオフィルムの形成や機能に関わるタンパク質や核 酸など他の分子についても可視化を行う予定である。







図2 藍藻バイオフィルムの超解像中赤外分光イメージング (左)藍藻と硫酸多糖標品の赤外分光スペクトルの比較。 藍藻バイオフィルムの(中)明視野像と(右)赤外吸収・自家蛍光強度画像。 文献6より転用。Under CCBY。

4. 今後の展望

本記事では、赤外分光法の生物計測への応用に関する 背景とその進展について説明した。従来の赤外分光イメー ジングの課題を打破する超解像イメージング技術とその特 徴を活かした生物計測の応用例を示した。この手法は、蛍 光と赤外吸収の同時イメージングが可能であり、藍藻バイ オフィルムの主要成分である藍藻と硫酸多糖を可視化する ことができる。その結果、バイオフィルム形成過程の分子 機構に関する有力な証拠を得ることに成功した。今後は、 レーザー走査光学系や情報科学的手法を導入することで、 広視野かつ高速な生物分析が実現し、藍藻の硫酸多糖スク リーニングへの応用も視野に入れている。これらの技術は、 藍藻バイオフィルムや硫酸多糖工学の研究の発展に寄与 するだけでなく、硫酸多糖が実用化された際の工場での品 質評価などのスクリーニング技術としても利用可能である。 また、バクテリアや真核の微生物、植物細胞や動物細胞を 広い研究対象に有効であると期待している。一方で、スペ クトルの詳細な議論やFTIRと中赤外フォトサーマルの分光 特性の差異については引き続き議論が必要であろう。スペ クトルの定量的な議論のみであれば、現状は赤外吸収を直 接計測するFTIRの方が優位である。そのため、このような 超解像技術とFTIRのような装置はセットで利用する方が良 いと筆者は考える。

参考文献

- [1] センサイト・プロジェクト「中赤外光熱変換による化学組成の可 視化技術」
- [2] Kato, R.; Yano, T.; Tanaka, T. Multi-Modal Vibrational Analysis of Blend Polymers Using Mid-Infrared Photothermal and Raman Microscopies. *Vib. Spectrosc.* 2022, *118*, 103333.
- [3] Bai, Y.; Yin, J.; Cheng, J. X. Bond-Selective Imaging by Optically Sensing the Mid-Infrared Photothermal Effect. Sci. Adv. 2021, 7.
- [4] Tamamitsu, M.; Toda, K.; Shimada, H.; Honda, T.; Takarada, M.; Okabe, K.; Nagashima, Y.; Horisaki, R.; Ideguchi, T. Label-Free Biochemical Quantitative Phase Imaging with Mid-Infrared Photothermal Effect. *Optica* 2020, *7*, 359.
- [5] Kato, R.; Yano, T.; Minamikawa, T.; Tanaka, T. High-Sensitivity Hyperspectral Vibrational Imaging of Heart Tissues by Mid-Infrared Photothermal Microscopy. *Anal. Sci.* 2022, *38*, 1497–1503.
- [6] Kato, R.; Maeda, K.; Yano, T. A.; Tanaka, K.; Tanaka, T. Label-Free Visualization of Photosynthetic Microbial Biofilms Using Mid-Infrared Photothermal and Autofluorescence Imaging. *Analyst* 2023, *148*, 6241–6247.



スペクトルアドバイザー機能について

分析計測事業部 スペクトロビジネスユニット山下 浩豊

2023年12月7日にフーリエ変換赤外分光光度計「IRSpirit-Xシリーズ」に対応した島津FTIR制御ソフトウェアLabSolutions IR Version 2.33をリリースしました。そこで、今回は本バージョンに搭載されたスペクトルアドバイザー機能に関してご紹介し ます。

1. はじめに

FTIR分析は迅速に測定でき、かつ光源に赤外線を使用し ているため、試料へのダメージが少ないなどのメリットが ありますが、質の高いスペクトルを得ることやその解釈に は豊富な専門知識が必要となります。これは、特にFTIR分 析経験の浅い分析者にとっては難しいタスクとなります。試 料を測定した結果、良好なスペクトルが得られない場合、 分析者はその問題の原因を、試料の前処理や測定条件の 設定、測定時の周辺環境の影響など、様々な要因の中から 特定しなければならず、これはFTIR分析における大きな障 壁となっています。 島津製作所は、このような「熟練した分析者でなくても 良好なデータを取得したい」というニーズに目を向け、 FTIR分析経験の浅い分析者でも質の高いスペクトルを取 得できるようにサポートする「スペクトルアドバイザー」機 能を本バージョンから標準搭載しました。なお、本機能は LabSolutions IRで制御可能な、全ての島津FTIRでご利用 いただけます。

今回は本機能の詳細や操作の流れについてご紹介し ます。

2. スペクトルアドバイザー機能とは

スペクトルアドバイザーは、スペクトルの取得後にデー タの質を確認するため、対話形式でデータの質が悪い原因 を特定し提示する機能です。原因の候補が特定されると、 良好なスペクトルと質の悪いスペクトルの両方が表示さ れ、分析者が取得したスペクトルと比較することで原因を 特定することができます。また、原因を解決するための具 体的な方法も提示されます。この機能は、赤外顕微鏡を用 いた透過/反射/ATR測定用として、2023年2月に島津赤 外顕微鏡 AIMsight および赤外ラマン顕微鏡 AIRsight 制御 ソフトウェア AMsolution Ver. 1.10 で初めて標準装備しま したが、今回、FTIR本体の透過/反射/ATR 測定にも対応 しました。取得したデータに対して、それぞれ特有の原因 を特定し、解決策をご提供しております。

なお、対応可能な手法と具体的な測定に関しては、表1 をご覧ください。

3章では、本機能の操作の流れを順番にご説明します。

手法	具体的な測定
透過	フィルムホルダを使用した透過測定、KBr錠剤の透過測定、液体セル/液体用気密セル/固定セルやガスセル を使用した透過測定
反射	正反射測定(SRM)、高感度反射測定(RAS)、拡散反射測定(DRS)
ATR	1回反射ATR測定、多重反射ATR測定

表1 対応可能手法と具体的な測定

3. スペクトルアドバイザーの操作方法

スペクトルアドバイザー機能は、LabSolutions IRの再解 析プログラムまたはスペクトル測定プログラムの表示画面 から起動できます。 ソフトウェア上で解析の対象としたいスペクトルデータを 開いた状態にしておき、図1の「スペクトルアドバイザー」 ボタンをクリックするとプログラムが起動します。



図2 スペクトルアドバイザーの操作

プログラム起動時の図2(a)の画面では、測定手法を透 過、反射、ATRから選択します。この項目はLabSolutions IRで開いている、データ(アクティブデータ)を判断して自 動で設定されます。また、同じ画面で、気になる項目がベー スラインに関連したものなのか、もしくはピークに関連した ものなのか、どちらであるか選択し、「OK」ボタンをクリッ クすると次の画面に進みます。図2(a)では、測定手法に「透 過」、気になる項目として「ベースライン」を選択しました。 「次へ」をクリックすると、図2(b)に示した画面に遷移し ます。 ベースラインに関する「最も気になる点を選択してくだ さい」では、図2(b)に示したようにベースライン関連の 原因に関するさまざま選択肢が提供されます。もしボタン 上の表記でイメージが掴めない場合には、マウスカーソル をボタンの上に移動させてください。すると、図2(c)のよ うにボタンの上に具体例が表示されます(ここでは、「ノイ ズが大きい」にカーソルを合わせた際に出現する良好なス ペクトルと質の悪いスペクトルの重ね描きが表示されてい ます)。図2(b)もしくは図2(c)では「ノイズが大きい」 を選択しました。「次へ」をクリックすると、図2(d)に示し た画面に遷移します。

図2(d)では、ノイズの大きい波数領域を選択します。 ここでは「全体的に」をクリックしました。

以上のように、透過法で取得したデータに対して、ベー スラインにノイズが多く、その波数領域は全体であるとの 情報を基にスペクトルをチェックし、その結果として、原因 (図2(e)を参照)と解決方法(図2(f)を参照)を表示し ました。

図2(e)では、スペクトルのノイズが大きい原因として「積 算回数が少ない」、「バックグラウンド測定のパワー値が小 さい」、そして「付属品が適切に設置できていない」と3つ の可能性が考えられると指摘し、それぞれの原因に対する 解決方法を提案していることがわかります。これらの情報を 参考にして、分析者は示された解決方法を実施して再測定 することで、良好なスペクトルデータを取得することが可能 となります。

また、図2(e)で示された可能性の1つに「バックグラウ ンド測定のパワー値が小さい」があり、解決方法として「自 動調整を実行」があります。しかしながら、自動調整の方法 がわからない場合を考慮し、図2(e)の画面内には「自動 調整の方法」ボタンを配置しております。このボタンの上に マウスカーソルを移動させると、図2(f)に示したように、 LabSolutions IRソフトウェアで自動調整を実行する方法が 表示されます。

4. まとめ

今回はFTIR分析経験の浅い分析者でも質の高いスペクトルが取得できるように、対話形式でデータの質が悪い原因を特定し、解決方法を提供する「スペクトルアドバイザー」機能をご紹介しました。また、弊社発行のアプリケーションニュース^[1]では、スペクトルアドバイザー機能の活用例もご紹介しておりますので、是非ご覧ください。

なお、今回はスペクトルの取得後にデータの質を確認す るためのサポート機能をご紹介しましたが、弊社ではスペ クトル測定をサポートする分析ナビゲートプログラムIR Pilotもご提供しております。IR Pilotとスペクトルアドバイ ザー機能を併用してご使用いただくことで、FTIR分析経験 の浅い分析者でも効率的な測定・解析が可能になります。

参考文献

[1] 顔旭、丸山かれん、"スペクトルアドバイザー機能を活用した FTIRによるリサイクルプラスチックの分析"、島津アプリケーション ニュース 01-00653-JP (初版: 2023年12月)

赤外スペクトル解析のポイント ー脂肪族不飽和炭化水素 (オレフィン)・芳香族編-

分析計測事業部 Solutions COE 丹下祥之

1. はじめに

前号 (FTIR TALK LETTER Vol.42) では、脂肪族飽和炭化 水素 (パラフィン) について、赤外スペクトル解析のポイント をご紹介しました。また応用編として、ポリエチレン (PE) に おける結晶性 (密度) の違いとポリプロピレン (PP) の分子 配向に影響する分子振動モードについてもご紹介しました。 今回は、分子構造の中に炭素同士の二重結合を持つ脂肪 族不飽和炭化水素(オレフィン)とベンゼン環を持つ芳香族 の赤外スペクトルの解析方法についてご紹介します。

2. 赤外スペクトルによるオレフィン・芳香族の分類

図1には炭素と水素のみで構成された炭化水素の主な ピークの位置と分類方法の例を示します。高波数側から低 波数側に、順にピークの有無を確認することで、3種類の 炭化水素 (パラフィン、オレフィン、芳香族) を簡単に分類 することができます。



図1 パラフィン・オレフィン・芳香族の赤外スペクトルピーク位置と分類フローチャート



図2 3,000 cm⁻¹付近のピークの帰属^[1]

3,000 ~ 2,800 cm⁻¹付近のピークはC-H伸縮振動に由 来するため、パラフィン、オレフィン、芳香族すべてにおい て見られます。今回ご紹介するオレフィンや芳香族は、 -C=C-Hや-C≡C-Hのように、C-Hの炭素と隣接した炭素 間に二重結合や三重結合を持つため、C-H伸縮振動は 3,000 cm⁻¹を超える高波数域に現れます。 次に、オレフィンと芳香族の区別に役立つ、1,650 cm⁻¹ および1,600 cm⁻¹付近に出現するC=C伸縮振動に由来す るピークについてご紹介します。図3には1,700~1,400 cm⁻¹付近のイソプレンゴム(IR)およびポリスチレン(PS) のスペクトルを示します。



図3 1,650 cm⁻¹~1,450 cm⁻¹付近のピークの帰属^[1]

イソプレンゴムの1,665 cm⁻¹付近のピークはC=C伸縮振 動に由来するピークです。一方で、ポリスチレンの1,600、 1,490 および1,450 cm⁻¹付近のピークは、ベンゼン環のC=C 伸縮振動とC-C伸縮振動によって生じるベンゼン環の振動 に由来します。ベンゼン環のC原子間ではC=CとC-Cが交 互に入れ替わる共鳴という現象が生じます。これにより、オ レフィンのC=Cに比べて、ベンゼン環のC=C結合は弱くな るため、ピーク位置はオレフィンと比較して低波数側にシフトします。

次に、オレフィンの1,000~800 cm⁻¹付近に出現する、 C=C-H面外変角振動に由来するピークと構造異性体につい てご紹介します。図4に様々なオレフィンの構造と、それらの 構造におけるC=C-H面外変角振動由来のピーク位置を示し ます。





図5には、ビニル基と三置換体の構造を持つ1,2-ポリブタジエンとイソプレンゴムについて、C=C-H面外変角振動が見られる 1,100~600 cm⁻¹付近のスペクトルを示します。



図5 990 cm⁻¹付近、910 cm⁻¹付近、840 cm⁻¹付近のピークの帰属^[1]

ビニル基を持つ1,2-ポリブタジエンは、990 cm⁻¹付近と 910 cm⁻¹付近に2つのピークを持ちますが、三置換体のイ ソプレンゴムは840 cm⁻¹付近にピークを1つ持つのみであ るとわかります。このように、1,000 ~ 800 cm⁻¹付近のピー ク位置を用いて、オレフィン構造中の置換基の位置を推定す ることができます。置換基の位置と赤外スペクトルに現れる ピーク(本数と位置)の関係の詳細は参考文献[2]をご覧く ださい。なお、置換基の位置に極性の高い官能基が配置さ れる場合や共役系を形成する場合は、置換基の位置推定が 困難になります。例えば、CIやBrなど極性の高いハロゲノ基 が構造中にある場合は、図4に記載したピーク位置から大き く低波数側にシフトします^[1]。 ここまでは、オレフィンにおけるC=C-H面外変角振動による構造の区別をご紹介しましたが、芳香族の場合にも置換 基の位置推定にC=C-H面外変角振動由来のピークを用いる ことができます。

図6には芳香族の置換基の位置と、ピーク位置および本

数の関係を示しました。図6に示したように、芳香族の場合 には900~670 cm⁻¹付近にC=C-H面外変角振動に由来す るピークが出現します。また、2,000~1,660 cm⁻¹付近には C=C-H面外変角振動の倍音や結合音に由来するピークも出 現します。



縦軸は高波数側と低波数側の目安としての相対的な強度を表している。 低波数側の青線部分にピークが現れる場合がある。

図6 芳香族の置換基の位置とピーク位置および本数の関係



芳香族の構造異性体の例として、図7にはm-キシレン(1,3-二置換体)とp-キシレン(1,4-二置換体)の赤外スペクトルを示します。



図7 900 cm⁻¹付近、800 cm⁻¹付近、780 cm⁻¹付近、680 cm⁻¹付近のピークの帰属^[1]

芳香族における置換基の位置や個数によって、C=C-H面 外変角振動由来のピーク位置や本数も変化するため、これ らのピーク位置と本数を確認することで、構造を推定するこ とが可能となります。また、図6に示したように、2,000 ~ 1,660 cm⁻¹付近にもピーク強度は弱いですが、C=C-H面外 変角振動の倍音や結合音に由来するピークが確認されま す。これらのピークは赤外吸収を示す官能基が非常に少な い波数領域に出現するため、900 ~ 670 cm⁻¹付近のピーク と合わせて確認することで、推定の精度を高めることができ ます。 なお、芳香族化合物の中には、ニトロ基やカルボキシ基* などの極性の強い置換基を持つものも多くあります。この 場合、図6に示した置換基の位置と900~670 cm⁻¹付近 のピークの関係性は崩れ、低波数側にピークがシフトする、 もしくは置換基に由来するピークと重なるなどの理由で、判 断が難しくなります^{[1],[3]}。

※IUPAC命名法の勧告により-COOH置換基はカルボキシ基と呼称します。

3. ブタジエンゴムのトランス型とシス型の区別

広く応用されているポリオレフィンに、ゴム材料がありま す。ブタジエンゴム(BR)はスチレンブタジエンゴム (SBR)や天然ゴム(NR)と並ぶ代表的な汎用ゴムの一つ です。ブタジエンゴムは1,3-ブタジエンというモノマーが 付加重合することで合成されます。そして、重合後のブタ ジエンゴムは3種類の幾何異性体の混合物になります。な お、3種類の幾何異性体の内訳は、図5に記載したビニル 型(1,2-ポリブタジエン)と、トランス型(trans-1,4結合)、 そしてシス型(cis-1,4結合)であり、重合方法や用いる触 媒を変えることで、幾何異性体の割合をある程度コント ロールすることができます^[4]。特にシス型を90%以上含 むブタジエンゴムは高シスブタジエンゴム、40%以下のも のは低シスブタジエンゴムと呼ばれ、目的に応じて使い分 けられています。車のタイヤを例に挙げると、引張弾性の 優れる高シスブタジエンゴムはサイドウォールに用いられ ており、耐摩耗性に優れる低シスブタジエンゴムはトレッ ド面 (地面との接地面) に用いられています。

高シスブタジエンゴムと低シスブタジエンゴムの赤外ス ペクトルは、ビニル基、trans-ビニレン基、cis-ビニレン基 の割合の違い、C=C-H面外変角振動(1,000~800 cm⁻¹付 近)で区別することができます。図8に高シスブタジエンゴ ム、低シスブタジエンゴム、高トランスブタジエンゴムの赤 外スペクトルを示しました。幾何異性体の含有量に応じて 該当の波数範囲の形状が大きく異なるため、赤外スペクト ルはブタジエンゴムの種類を区別するために役立ちます。



図8 高シス、低シス、高トランスブタジエンゴムの赤外スペクトル

4. まとめ

今回ご紹介した赤外スペクトル解析のポイントを以下に まとめて記載します。

- C-H伸縮振動由来のピーク位置が3,000 cm⁻¹を超えた波 数域に存在しているかどうかを確認することで、パラフィ ンとオレフィンおよび芳香族を区別できる。
- オレフィンと芳香族の区別はC=C伸縮振動に注目する。 1,650 cm⁻¹付近にピークがある場合はオレフィン、1,600 cm⁻¹と1,500 cm⁻¹付近にピークがある場合は芳香族と判 断できる。
- オレフィンの幾何異性体/構造の区別はC=C-H面外変角 振動(1,000 ~ 800 cm⁻¹付近)に注目する。これはブタジ エンゴムの構造の区別(高シス、低シス)に応用できる。
- 芳香族の置換基の位置の推定にはC=C-H面外変角振動 (900~670 cm⁻¹付近)に注目する。微弱であるが、補助 的にC-H面外変角振動の倍音や結合音(2,000~1,660 cm⁻¹付近)も活用するとよい。

次回は、カルボニル基に関する解析ポイントをご紹介し ます。

参考文献

- [1] 田中誠之,寺前紀夫,「赤外分光法」,共立出版(1993)
- [2] N. B. Colthup : J. Opt. Soc. Am. 40, 397 (1950)
- [3] P. J. Larkin : "Infrared and Raman Spectroscopy : Principles and Spectral Interpretation, Second Edition", Elsevier (2017)
- [4] 曽根卓夫,日本ゴム協会誌,88,178(2015)

マイクロプラスチック (MPs) の 多角的な分析評価に対応するラインナップ

当社では、マイクロプラスチックの前処理から観察、粒子計測、成分分析に至るすべての工程で、 お客様のニーズに適したさまざまな機器をご提供します。

環境表層水中のマイクロプラスチックを抽出するための自動前処理装置や、

非破壊で簡便に成分分析が可能なフーリエ変換赤外分光光度計、赤外顕微鏡などをラインナップしています。



本文書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。 なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。



分析計測事業部 604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

