アプリケーションノート

SORS 技術による 化学物質の同定



Agilent Resolve ハンドヘルド型 SORS システムによる不透明な容器越しの 燃料の検出



著者

Ricardo Nobara and Ana Blanco Agilent Technologies, Inc.

概要

Agilent Resolve ラマンハンドヘルド透過型同定システムでは、アジレント独自の空間オフセット型ラマン分光 (SORS) 技術によって、色付のプラスチックや不透明なプラスチック、黒ガラス、紙、布地などの遮蔽物に隠された物質を同定できます。

本アプリケーションノートでは、Resolve ラマンシステムがどのように、不透明な容器中の特定の石油 化学配合物を容易に識別するかを詳細に説明します。容器を開けることなく、2分足らずの高速な分析 時間で、燃料を迅速に同定できます。

Resolve は、当局が不法な石油化学製品を同定するのに役立つ強力なツールです。この機能は、消費 者にリスクをもたらす違法燃料の輸入および石油精製品への不法な混合物が増大していることから、 重要なものです。Resolve は、特定の燃料配合物を同定することもでき、プロセスや輸送中の漏出源を 容易に検出できます。

はじめに

不法燃料のサプライヤーは、輸入時に燃料品に 誤ったラベルを貼ったり、メタノール、ナフサ、 ベースオイルなどの低コスト成分を用いた危 険な混合物を作ったりすることによって、税金 を逃れます¹。不法な商品や密輸入された商品 に起因する収益低下による経済面での打撃は 重大なものとなる可能性があります。また、非 合法の燃料は、安全性規格や規制に準拠して おらず、公共および環境に対するリスクを引き 起こします。

Agilent Resolve ハンドヘルド型ラマンアナラ イザは、密輸入石油化学製品の同定において 当局を支援する強力なツールです。また、石 油化学プラットフォーム上、処理のあらゆる段 階、輸送時における漏出源の発見にも使用で きます。さまざまな混合、配合、オクタン価の 燃料が、特有のラマンスペクトルを生成するた め、ラマン分光分析を使用し、燃料の成分や タイプの同定が可能となります。さらに、空間 オフセット型ラマン分光(SORS)の透過モー ドを使用することで、さまざまな容器に収容さ れている燃料を開封せずに測定できます。

オクタン価が異なる 4 種類の燃料サンプルか らのスペクトルを Agilent Command Fleet Management ソフトウェアに転送してカスタ ム仕様の燃料用 Resolve ライブラリを構築し ました。本アプリケーションノートではライブラ リの作成および導入のプロセスの概要を紹介 します。

実験手法

使用装置

ポータブルな Resolve システムを使用して測 定を実行するには、図1に示す3つのオプ ションから容器を選択するだけです。本調査 では、Resolve システムの画面上で [Thick, Colored, or Opaque] (図1、左)を選択して SORS の透過モードで試験を実行しました。

可燃性物質と思われる物質をスキャンする場 合には配慮と慎重さが必要です。図 1 の右側 に示されるように、Resolve システムでは偶 発的な着火のリスクを最小限に抑えるために、 スキャン遅延を使用して動作させたり、レー ザー出力を低減させたりすることができます。 Resolve システムは、オペレータの安全を向 上させるために、リモート表示機能(オプショ ンの Wi-Fi 接続)で操作することも可能です。 本アプリケーションノートに記載された作業の ために、SORS 透過モードにして、デフォルト の取り込み設定およびフルレーザーパワーで Resolve ハンドヘルド型ラマンアナライザを使 用しました。

サンプル

Command ソフトウェアの燃料スペクトルライ ブラリを作成するために使用したサンプルはす べて図 2 に示されている市販されている次の 燃料です。

- ディーゼル
- ガソリン 87 オクタン
- ガソリン 89 オクタン
- ガソリン 92 オクタン



図2. ガソリンスタンドで市販されている一般的な燃料

各燃料サンプルは、図3に示すようにフルサイ ズのプラスチック燃料容器に移しました。



図 3. 燃料は多くの場合、不透明な色付きプラスチック容器に移されます。



図1. 左: Agilent Resolve ハンドヘルド型ラマンアナライザの動作モードの選択肢。SORS 透過測定(厚みのある、 色付き、または不透明)、表面スキャン(透明バッグまたは遮蔽物なし)、またはガラスバイアル測定(バイアル)。 右:レーザー出力の低減およびスキャン遅延タイムの設定を行うリスク評価画面

ライブラリの作成

Resolve システムを使用してデータを採取 した後、4 種類の燃料サンプルのスキャンを USB メモリを介してデスクトップコンピュータ にエクスポートしました。Agilent Command Fleet Management ソフトウェアを使用し、 ファイルを開いてスペクトルデータを基に燃 料のカスタムライブラリを作成しました。図 4 で概説するように、Command でのライブ ラリ作成プロセスは高速でシンプルです。 Command では、繰り返し測定から取り込ん だデータの平均を使用し、必要な場合は若干 の補正を行い、メタデータを追加します。ライ ブラリが作成されると、PC から元の Resolve アナライザや複数の Resolve アナライザへ アップロードするために Command ライブラ リファイルが生成されます。 Command ソフトウェアのカスタム燃料ライブ ラリを Resolve にインストールした後、メソッ ドの性能を確認するために新たな測定セット を燃料容器に対して実行しました。フルレー ザーパワーを使用し、SORS 透過モードで Resolve システムを操作しました。



図 4. データ採取、ライブラリ作成、Agilent Command ソフトウェアから 1 台のまたは複数台の Agilent Resolve ハンドヘルド型ラマンアナライザへのユーザーが作成した燃料 ライブラリのアップロードのワークフロー

結果と考察

Resolve アナライザは、不透明な色付きプラ スチック容器内の各燃料に対して、完全に自 動化された SORS 測定を2分足らずで実行し ました。さまざまな燃料の透過ラマンスペクト ルを図5にプロットしました。ディーゼルとガ ソリンのサンプルのスペクトルには明確な違い がありますが、3種類のガソリンサンプルの目 視による識別はより困難です。 Command を使った、4 つのスペクトルをベー スとする燃料ライブラリの Resolve アナライ ザへのロードが完了した後、サンプルを再びス キャンしました。図6は、Resolve が不透明な 色付きプラスチック燃料容器のそれぞれの中 味をライブラリスペクトルと照合して、100% 一致の値で正しく同定したことを示しています。

Resolve アナライザの画面に、Command ラ イブラリ内のスペクトルに対して最も一致する 単一の結果 (87 オクタン、89 オクタン、92 オクタン、ディーゼル)が表示されています。 より低い一致結果、サンプルおよびリファレンス (ライブラリ)のスペクトル、メタデータを画 面に表示させることも可能です。



図 5. Agilent Resolve ハンドヘルド型ラマンアナライザを SORS 透過モードで使用して得た 4 種類の市販燃料の ラマンスペクトル



図 6. Agilent Resolve アナライザとカスタム「燃料」 ライブラリを使用して、厚みのある赤色プラスチック 容器越しに実施された4種類の燃料の透過型サンプ ル測定での100%一致の値

結論

今回の調査から、燃料の同定における SORS 透過モードでの Agilent Resolve ハンドヘルド 型ラマンアナライザの有効性が示されました。

- アジレントの SORS 技術は、不透明な容 器越しの高品質データの直接的な採取を 可能にします。
- Resolve の機能は、オペレータのリスクおよび測定時の化学物質への曝露を最小限に抑えるように設計されています。サンプルを分析するために容器を開ける必要はなく、レーザー出力を調整でき、リモート表示を使用して遠隔からの測定が可能です。
- Agilent Command Fleet Management ソフトウェアを用いて、新しいサンプルスペ クトルを Resolve ライブラリに容易に追 加できます。

Resolve は本調査の4つの試験すべてにおい て、中身の見えない容器に入った燃料物質を 容易に同定しました。いずれのケースでも、厚 い赤色のプラスチック容器ごしの透過型測定 であったにもかかわらず、ライブラリスペクト ルとの高い一致が見られる測定結果のスペク トルが得られました。

参考文献

 Oil Price Information Service (OPIS), Mexico 101: Illegal Fuel Imports and Blends, April **2023**, accessed September 2023, https://blog. opisnet.com/mexico-101-illegal-fuelimports-and-blends

詳細情報

Resolve ハンドヘルド型ラマンアナライザ Command Fleet Management ソフトウェア Resolve ハンドヘルド型ラマンアナライザの FAQ ラマン分光分析の FAQ セキュリティ、防衛、初動対応のソリューション

【お問い合わせ先】

Agilent ラマン製品に関する販売およびサポートは、 ジャパンマシナリー株式会社に委託しております。 お問い合わせはジャパンマシナリー株式会社までお願いいたします。

ジャパンマシナリー株式会社

電話番号:

03-3730-4891

お問い合わせフォーム:

https://www.japanmachinery.com/contact/

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、 医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。 本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに 変更されることがあります。

DE43982449

アジレント・テクノロジー株式会社 © Agilent Technologies, Inc. 2023 Printed in Japan, August 24, 2023 5994-6699JAJP

