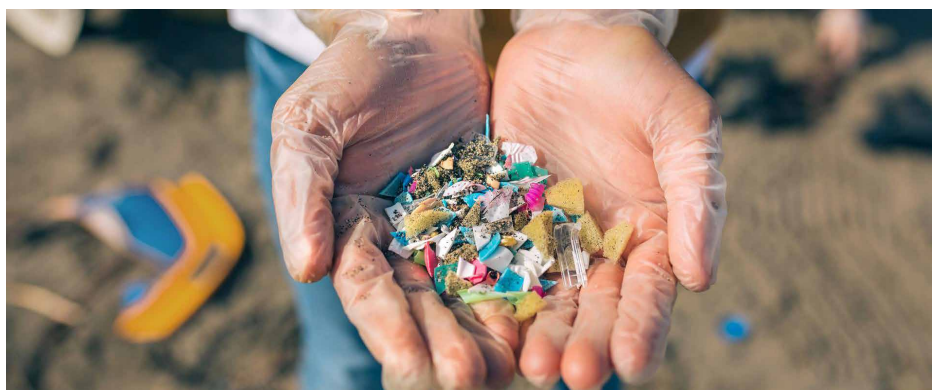


## FTIR 分光分析法を用いたプラスチック片の 高速かつ簡単な物質同定

Agilent Cary 630 FTIR と ATR による海岸漂着ごみの  
ポリマータイプの同定



### 著者

Wesam Alwan and Fabian  
Zieschang  
Agilent Technologies, Inc.

### はじめに

合成プラスチックが発明・開発され、生産が始まったばかりの頃は、生産量は少なく廃プラスチックの処理は比較的制御可能でした。しかし、ここ数十年で、プラスチックの生産量は他のどの材料の生産量よりも速く増加してきました。現在、推定 4 億トンのプラスチック廃棄物が毎年生み出されており、その大部分が最終的に自然環境内に行き着きます。<sup>1</sup>

最近の研究では、プラスチック汚染が海岸生態系をはじめとする陸上生態系にどのような影響を与えるかが調査されています。<sup>23</sup>プラスチック汚染が環境に及ぼす影響を理解するための重要な一歩は、プラスチック廃棄物やマイクロプラスチック粒子を同定できる分析メソッドの進歩です。

フーリエ変換赤外 (FTIR) 分光分析は、信頼性が高く、高品質のデータが取得でき、コスト効率の高い分析が可能であるため、さまざまな種類のプラスチックの同定に最適です。本検討では、Agilent Cary 630 FTIR (図 1) を用いて、プラスチック片の物質同定を簡単なワークフローでいかに実現するかに焦点を当てます。ワークフローには、サンプル前処理法、ライブラリの作成、サンプル分析、およびデータ報告が含まれます。



図 1. ダイヤモンド減衰全反射 (ATR) モジュールと組み合わせた Agilent Cary 630 FTIR

## 実験

### サンプル

プラスチック片は、オーストラリア・ビクトリア州モーディアロックビーチから無作為に収集されたものです。本検討では、環境中で目に見えて劣化した合計 9 つのサンプルを選択しました (図 2)。



図 2. 本検討で、オーストラリアのビーチから収集し、Agilent Cary 630 FTIR を使用して分析したプラスチック片

### 装置構成

本検討では、ダイヤモンド ATR モジュールが搭載され、Agilent MicroLab ソフトウェアで制御される Cary 630 FTIR 分光分析計を使用しました (図 1)。このソフトウェアは、画像によるインターフェースを使用して分析手順を分析担当者にガイドします。サンプルとダイヤモンド結晶の接触を最大化するために、ブレードを使用して各硬質プラスチックサンプルの薄片 (約 2 mm) を作成しました。サンプルをプラットフォーム上に配置し、表 1 に示されている操作パラメータを使用して FTIR-ATR により直接測定を行いました。

### ライブラリの作成

プラスチック片サンプルの同定は、プラスチック産業で使用される最も一般的なポリマーの ATR スペクトルを含む、ユーザー作成のポリマーのライブラリを参照して実施しました。このライブラリは、Polymer Sample Kit (Scientific Polymer Products, Inc.、カタログ番号 205、LOT 番号 600801012) を使用して開発されたもので、ポリスチレン、ポリプロピレン、高密度ポリエチレン、低密度ポリエチレン、ポリエチレンテレフタレート、ポリ塩化ビニル、ポリカーボネート、ポリメチルメタクリレート、ポリオキシメチレン、ポリアミド、ポリテトラフルオロエチレンなどが含まれます。

ライブラリ検索メソッドには類似検索アルゴリズムを使用しました (表 1)。スペクトルライブラリは、MicroLab ソフトウェアで簡単に作成・維持・管理できます。新しいライブラリは数秒で作成できます。スペクトルは、作成時に追加することもできますし、結果画面から直接追加するなど、いつでもライブラリに追加できます。

表 1. Agilent Cary 630 FTIR-ATR 操作パラメータ

パラメータ	設定
メソッド	ライブラリ検索
使用ライブラリ	ユーザー作成のポリマーライブラリ (Agilent Internal Mini)
検索アルゴリズム	類似性
スペクトル範囲	4,000 ~ 650 cm <sup>-1</sup>
バックグラウンドスキャン回数	64
サンプルスキャン回数	64
スペクトル分解能	4 cm <sup>-1</sup>
バックグラウンド収集	空気
色分けされた信頼度のスレッシュホールド	緑 (高信頼度) > 0.95 黄 (中信頼度) 0.90 ~ 0.95 (低信頼度) < 0.90

## 結果と考察

図 2 に示すさまざまなサンプルではそれぞれ色が異なりますが、9 つのプラスチック片サンプルのうち 8 つはポリプロピレンであると同等され、1 つのサンプルは高密度ポリエチレンであると同等されました。表 2 に示すように、ポリプロピレンのヒットオリアティンデックス (HQI) の結果は 0.94651 ~ 0.99405 の範囲で、高密度ポリエチレンの HQI は 0.97110 でした。

HQI はライブラリ項目ごとに自動的に計算され、その値は測定されたスペクトルとライブラリのスペクトルがどの程度一致しているかを示します。HQI は、物質の同定における判定基準としてよく用いられます。本検討で適用したユーザー定義が可能な基準を表 1 (色分けされた信頼度のスレッシュホールド) に示します。

表 2. 風化したプラスチック片サンプルの物質同定結果の概要

サンプル名	画像	物質同定	ヒットオリアティンデックス
水色のプラスチック		ポリプロピレン	0.98133
緑色のプラスチック		ポリプロピレン	0.94651
黄色のプラスチック		ポリプロピレン	0.98414
青色のプラスチック 1		高密度ポリエチレン	0.97110
青色のプラスチック 2		ポリプロピレン	0.99405
オレンジ色のプラスチック 1		ポリプロピレン	0.98940
赤色のプラスチック		ポリプロピレン	0.97501
オレンジ色のプラスチック 2		ポリプロピレン	0.98414
青色のプラスチック 3		ポリプロピレン	0.99034

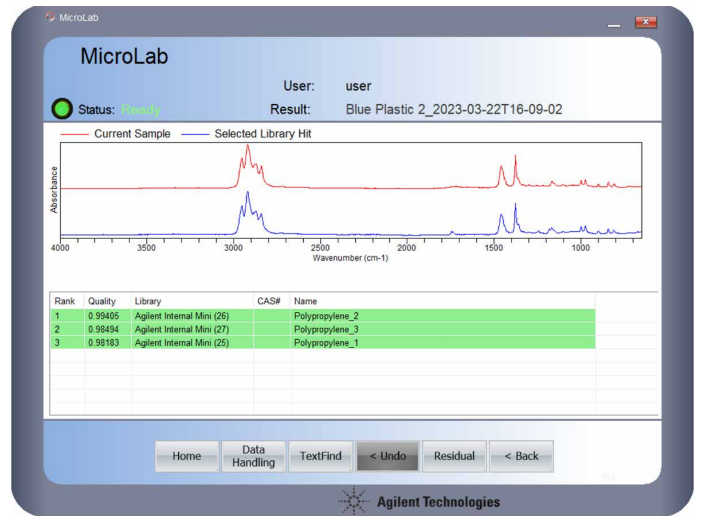
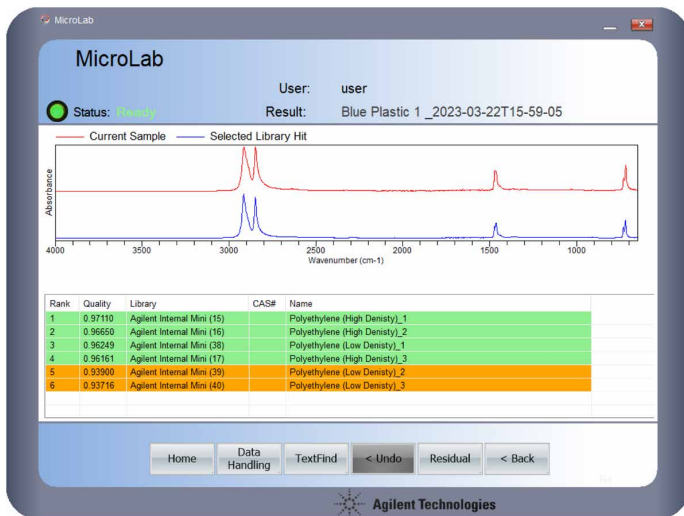


図 3. Agilent Cary 630 FTIR によるプラスチック片（赤のトレース）とライブラリヒット（青のトレース）の定性分析例。この表は、各サンプルのヒットオリティ、使用ライブラリ、ヒット名を示しています。HQI に基づいて結果を色分けすることにより、信頼レベルを定義することができます。これにより、ユーザーは結果を解釈しやすくなり、エラーにつながる可能性のある見落としを減らすことができます。

解釈が容易となるように、各サンプルで得られた色分けされた物質の同定結果が画面に表示されます（図 3）。この機能により FTIR システムは、迅速な意思決定を可能にする、すぐに導入・稼働できるソリューションとなります。

Cary 630 FTIR 分光分析計は、MicroLab ソフトウェアを使用して制御されます。このソフトウェアは、サンプルの導入からレポートまでの一連の分析手順を、画像インターフェースを使用してユーザーにガイドします（図 4）。

ATR モジュールを搭載した Cary 630 を使用すると、更新と最適化が簡単なライブラリを作成できます。MicroLab では、さまざまな分析ニーズに対応できる複数のライブラリ検索アルゴリズムの利用が可能で、機器の柔軟性が高まります。



図 4. 直感的な Agilent MicroLab ソフトウェアのワークフローにより、Agilent Cary 630 FTIR を用いて答えを簡単に見つけることができます。このソフトウェアは手順を画像で提供しているため、トレーニングの必要性を減らし、ユーザーに起因するエラーのリスクを最小限に抑えます。

## 環境研究を対象としたアジレントのソリューション

アジレントは、世界中でプラスチックとマイクロプラスチックの研究を推進しています。現場・研究室・屋外の遠隔環境におけるプラスチックやマイクロプラスチックの分析が行えるさまざまなベンチトップやポータブルハンドヘルド機器を取り揃え、即時かつリアルタイムの結果を提供します。アジレントは、Agilent Cary 630 FTIR に加えて、次の機器も提供しています。



Agilent 8700 Laser Direct Infrared (LDIR) ケミカルイメージングシステム

マイクロプラスチックのイメージングとスペクトル分析において、洗練された新しいアプローチを提供します。



Agilent 4300 ハンドヘルド FTIR

エルゴノミクス（人間工学）による軽量性、使いやすさ、堅牢性、および柔軟性を1つのシステムに採用した、この種の機器としては初の装置。



Agilent 4500 シリーズ可搬型 FTIR

化学、石油化学、食品、ポリマー業界における入荷原料と出荷最終製品のオンサイト分析。



Agilent 5500 シリーズコンパクト型 FTIR 分光分析計

正確な結果を毎日迅速かつ確実に提供できるように設計されたコンパクトな現場分析装置。

## 結論

ATR サンプリグモジュールを取り付けた Agilent Cary 630 FTIR を用いて、オーストラリアのビーチから収集した劣化したプラスチック片の 9 つのサンプルを迅速かつ簡単に同定するメソッドを開発しました。

直感的な画像ガイドを用いる Agilent MicroLab ソフトウェアを使用してメソッドを設定し、一般的に使用されるポリマーの標準サンプルに基づいてユーザー作成ライブラリを構築しました。Cary 630 FTIR を用いて取得したサンプルスペクトルはポリマーライブラリ内のスペクトルと自動的に比較され、ユーザー定義のヒットクオリティ信頼限界に基づいて、ソフトウェアによりポリマーの種類を同定しました。

本検討では、ATR を備えた Cary 630 FTIR により、用途に合わせた簡単なメソッドを使用して廃プラスチックのポリマーの種類を迅速に同定できることが実証されました。

## 詳細情報

- Agilent Cary 630 FTIR
- Agilent MicroLab ソフトウェア
- Agilent MicroLab Expert ソフトウェア
- FTIR 分析とアプリケーションガイドの概要
- FTIR 分光分析法の基礎 - FAQ
- ATR-FTIR 分光分析の概要
- マイクロプラスチック技術の FAQ

ホームページ

[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)

カスタムコンタクトセンタ

**0120-477-111**

**email\_japan@agilent.com**

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。

DE4704429

アジレント・テクノロジー株式会社  
© Agilent Technologies, Inc. 2023  
Printed in Japan, May 17, 2023  
5994-5986JAJP

## 参考文献

1. United Nations Environment Program, Our Planet is Choking on Plastic, accessed April **2023**, <https://www.unep.org/interactives/beat-plastic-pollution/>
2. Andradý, A. L. Weathering and Fragmentation of Plastic Debris in the Ocean Environment, *Mar. Pollut. Bull.*, **2022**, 180:113761. doi: 10.1016/j.marpolbul.2022.113761. Epub 2022 Jun 1. PMID: 35665618
3. Lavers, J. L.; Rivers-Auty, J.; Bond, A. L. Plastic Debris Increases Circadian Temperature Extremes in Beach Sediments., *J. Hazard Mater.*, **2021**, 15; 416: 126140. doi: 10.1016/j.jhazmat.2021.126140. Epub 2021 May 17. PMID: 34492929