

## FTIR 分光分析によるライフサイクルを通じたプラスチックの材料同定

Agilent Cary 630 FTIR と ATR を用いたプラスチックのポリマーの種類同定



### 著者

Wesam Alwan and  
Fabian Zieschang  
Agilent Technologies, Inc.

### はじめに

日常生活でプラスチックがいかに広く使用されているかを考えると、そのライフサイクルについてより深く理解することは有益です。原油および天然ガスは、地中から抽出された後に精製され、エタンやプロパンなど複数の炭化水素生成物になります。<sup>1</sup> これらの生成物は、原材料、またはプラスチックペレットやナードルの構成成分となり、プラスチック製品を製造するために使用されます。最終製品に応じて、ナードルはプラスチック射出、成形機、ブローイングなど、異なるプロセスにより特定の形とサイズへと成型されます。最終プラスチック製品には、飲料や液体のボトル、梱包材料、ベビー用品、玩具、繊維、建築、その他多数の種類サンプルといった、多くの分野で使用される広範な品目が含まれます。<sup>2</sup>

プラスチック製品は使用后、リサイクルされたり、廃棄物として埋め立てられたり、焼却されたりします。プラスチックの収集と廃棄に欠点があるとすれば、廃棄物が環境中に留まる可能性があるということです（図 1）。また、プラスチック廃棄物の投棄や不適切な廃棄によって、環境中に残留するプラスチックの量が増加します。

図 1 に記載の各ステップにおいて、材料同定は非常に重要な品質保証や安全管理分析であり、プラスチック業界で広く実施されています。製造前と製造後の材料の分析により、最終製品が使用目的に必要な品質と純度を満たすことを確認します。したがって、材料同定は多数の業界標準で定められている要件となっています。リサイクルセンターではプラスチック廃棄物を特定するために同じ検査手法の使用が広まっており、リサイクルされたプラスチックの品質の維持と、環境から収集されたプラスチック破片の特定に役立っています。

フーリエ変換赤外（FTIR）分光分析は信頼性と品質の高いデータと、コスト効率的な分析を実現し、さまざまな種類のプラスチックの同定に最適です。このアプリケーションノートでは、Agilent Cary 630 FTIR 分光光度計（図 2）がプラスチックのライフサイクル全体で材料同定の簡単なワークフローを実現する方法に焦点を当てます。



図 2. ダイヤモンド減衰全反射（ATR）モジュールを備えた Agilent Cary 630 FTIR 分光光度計

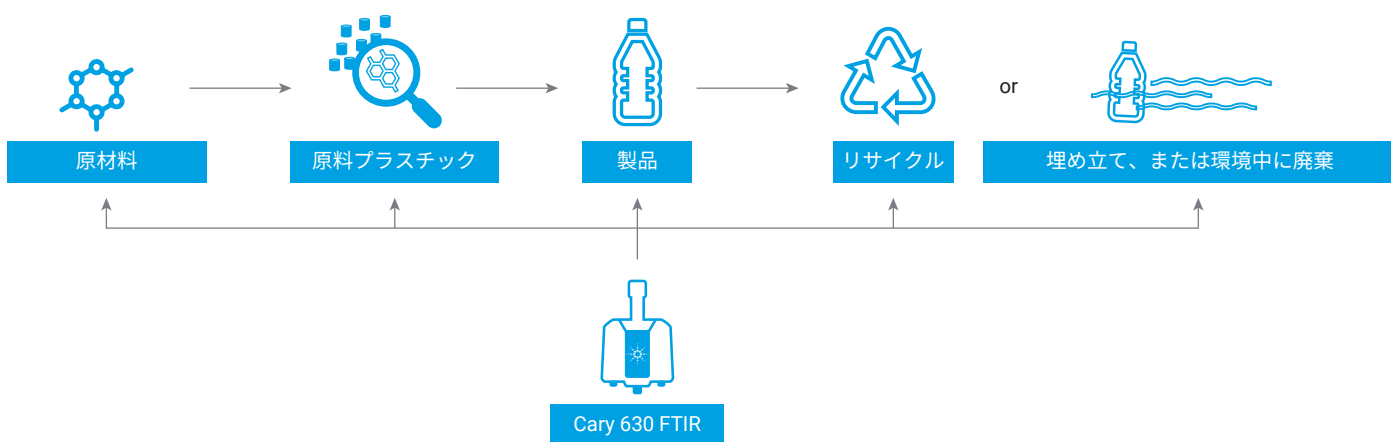


図 1. プラスチックのライフサイクル。プラスチックのライフサイクルの各段階において、材料同定は信頼性の高い品質管理を確保するとともに、原材料と最終製品に対し高精度の安全要件をもたらします。Agilent MicroLab ソフトウェアを搭載した Agilent Cary 630 FTIR により、さまざまなサンプルタイプの迅速かつ簡単で、信頼性の高い材料同定ワークフローを実施できます。

## 実験方法

**サンプル：**この研究では、プラスチックの製造、使用、リサイクル、廃棄の4つの段階を網羅するために、5つのサンプルを使用しました。

1. 可塑剤 - 原材料
2. ナードル - プラスチック原料
3. コーヒーの蓋 - プラスチック製品
4. 水ボトル - リサイクル製品
5. プラスチック破片 - 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

**機器：**この研究では、ダイヤモンド ATR モジュールを搭載した Cary 630 FTIR 分光光度計を使用しました (図 2)。

**ソフトウェア：**Cary 630 FTIR 分光光度計は、Agilent MicroLab ソフトウェアを使用して制御しました。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分析手順を、画像インタフェースを使用してユーザーにガイドします (図 3)。

**ライブラリ生成：**サンプル 1 は Agilent ATR デモライブラリにより同定しました。サンプル 2 ~ 5 は、Polymer Sample Kit (Scientific Polymer Products, Inc.、カタログ番号 205、LOT 番号 600801012) を使用してユーザーによって作成されたポリマーのライブラリにより同定しました。ユーザー作成のスペクトルライブラリには、以下のような、プラスチック業界で使用される最も一般的なポリマーの ATR スペクトルが含まれています。

- ポリスチレン (PS)
- ポリプロピレン (PP)
- 高密度および低密度ポリエチレン (HDPE および LDPE)
- ポリエチレンテレフタレート (PET)
- ポリ塩化ビニル (PVC)
- ポリカーボネート (PC)
- ポリメチルメタクリレート (PMMA)
- ポリオキシメチレン (POM)
- ポリアミド (PA)
- ポリテトラフルオロエチレン (PTFE)



① 分析開始

② 画像付きのソフトウェアガイダンスに従う

③ 色分けされた実用的な結果がすぐに表示される

図 3. 直感的な Agilent MicroLab ソフトウェアにより、Agilent Cary 630 FTIR 分光光度計では簡単に答えを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、ユーザーベースのエラーのリスクを最小限に抑えます。

ライブラリ検索メソッドには、表 1 に示すパラメータを使用した類似性検索アルゴリズムを適用しました。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、作成時やその他のタイミングで、結果画面から直接ライブラリに追加できます。

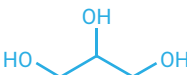




表 1. Agilent Cary 630 FTIR-ATR 操作パラメータ

パラメータ	設定
メソッド	ライブラリ検索
使用するライブラリ	ユーザー作成のポリマーライブラリ (Agilent Internal Mini) および Agilent ATR デモライブラリ
検索アルゴリズム	類似性
スペクトル範囲	4,000 ~ 650 $\text{cm}^{-1}$
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 $\text{cm}^{-1}$
バックグラウンド収集	空気
色分けされた信頼度のしきい値	緑 (高信頼度) > 0.95 黄 (中信頼度) 0.90 ~ 0.95 赤 (低信頼度) < 0.90

## 結果と考察

ダイヤモンド ATR サンプリングモジュールを備えた Cary 630 FTIR を使用して、プラスチックの代表的なライフサイクルを表す 5 つの異なるサンプルを特定しました。類似性アルゴリズムを使用してユーザー作成のスペクトルライブラリを検索し、> 0.97 のヒットクオリティインデックス (HQI) で、1 を最高の理論値として、5 つすべてのサンプルを特定しました。表 2 に示すように、HQI 値は 0.99599 (可塑剤、グリセロール)、0.99621 (プラスチックナードル、LDPE)、0.97809 (コーヒーの蓋、PS)、0.98622 (水ボトル、PET)、0.98940 (風化プラスチック、PP) でした。

表 2. Agilent Cary 630 FTIR-ATR と類似性検索アルゴリズムを使用して取得されたプラスチック材料同定の分析結果の概要

サンプル名	画像	材料同定	ヒットクオリティ インデックス
可塑剤 (原材料)		グリセロール	0.99599
プラスチックナードル (原材料)		LDPE	0.99621
プラスチック製品 (コーヒーの蓋)		PS	0.97809
リサイクルプラスチック (水ボトル)		PET	0.98622
風化プラスチック (廃棄物)		PP	0.98940

各サンプルに対し取得された材料同定の結果は、ユーザーが定義した信頼度のしきい値に基づき色分けされ、Cary 630 FTIR によって生成されたデータを簡単に確認できます (図 4)。この研究では、HQI が 0.95 以上の結果は緑色で表示され、優れたスペクトル照合を示しており、材料同定の信頼性が向上しました。Cary 630 FTIR システムは色分けされた結果を提供し、すぐに導入可能な使いやすいソリューションとなっており、迅速な意思決定を実現します。



図 4. Agilent Cary 630 FTIR 分光光度計による 5 つのプラスチックサンプル（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。この表は、ヒットクオリティ、使用したライブラリ、各サンプルのヒット名 (A) 可塑剤、(B) ナードル、(C) コーヒーの蓋 (D)、水ボトル (E)、風化プラスチックを示したものです。

## 結論

Agilent Cary 630 FTIR 分光光度計は、プラスチックの製造からリサイクルプラスチックや廃棄プラスチックまで、使用される原材料の材料同定を対象とした、使いやすいソリューションを実現します。

Cary 630 FTIR と MicroLab ソフトウェアは、ポリマーライブラリのすばやく簡単な生成を促進し、可塑剤、ナードル、コップの蓋、リサイクル水ボトル、海岸のプラスチック破片を迅速に同定できました。5 つのすべてのサンプルは、 $> 0.97$  のヒットクオリティインデックス (HQI) で、1 を最高の理論値として同定しました。MicroLab ソフトウェアでは HQI に基づき同定結果が色分けされるため、データの品質をすばやく簡単に確認できます。

この研究では、メーカー、リサイクル業者、環境研究者が求める材料同定を対象に、ATR サンプリングモジュールを備えた Cary 630 FTIR の優れた柔軟性が実証されました。

## 参考文献

1. Rhodes, C. J. Plastic Pollution and Potential Solutions, Sci. Prog., **2018** 101(3), 207–260. doi: 10.3184/003685018X15294876706211. Epub 2018 Jul 19. PMID: 30025551.
2. British Plastic Federation, Plastics Applications, accessed May 2023, <https://www.bpf.co.uk/plastipedia/applications/Default.aspx>

## 詳細情報

- Agilent Cary 630 FTIR 分光光度計
- Agilent MicroLab ソフトウェア
- Agilent MicroLab Expert ソフトウェア
- FTIR 分析およびアプリケーションガイド
- FTIR 分光分析法の基礎 - FAQ
- ATR-FTIR 分光分析の概要

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ー

**0120-477-111**

[email\\_japan@agilent.com](mailto: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。

DE43093893

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2023

Printed in Japan, June 6, 2023

5994-6145JAJP