

FT-IR スペクトルの読み方

福島県ハイテクプラザ 技術開発部 工業材料科 矢内誠人

Key Words: FT-IR、スペクトル解析、ノイズ、ライブラリ、混合物、

1. FT-IR スペクトル

FT-IR(フーリエ変換赤外分光分析)は有機物の定性分析において威力を発揮する分析方法である。この分析により、異物の特定やプラスチック材料の劣化など、様々な情報が得られる。

測定結果は縦軸が透過率(%)、横軸が波数(cm^{-1})で示される。測定原理については別紙(Vol.2 FT-IR 分析について)を参照いただきたい。

未知試料の場合、測定結果のデータはライブラリとの照合を行い、物質の特定を行う。しかし、その結果が必ずしも正しいとは限らない。

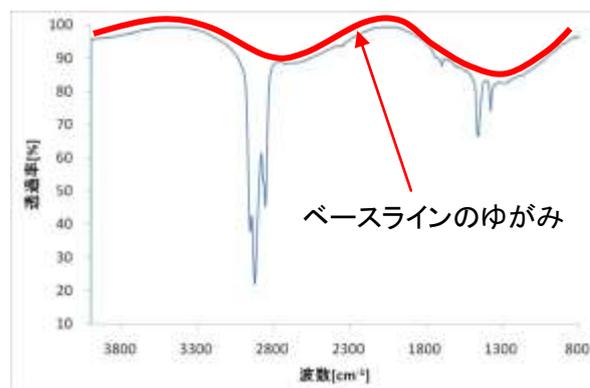
例えば混合物の場合、スペクトルは 2 種類の物質の足し合わせた結果で得られる。スペクトルの結果から単一物質なのか、混合物なのかを判断するにはある程度経験が必要である。また、得られたピークが測定対象のものなのか、測定の影響によって現れるものなのかを判断する必要がある。

2. よくあるノイズ

測定環境、サンプリングの都合でスペクトルにノイズがのることがある。この場合、条件を変えて測定することで解消されるケースが多い。以下に具体的な例を示す。

①周期的な波がスペクトルに反映される。

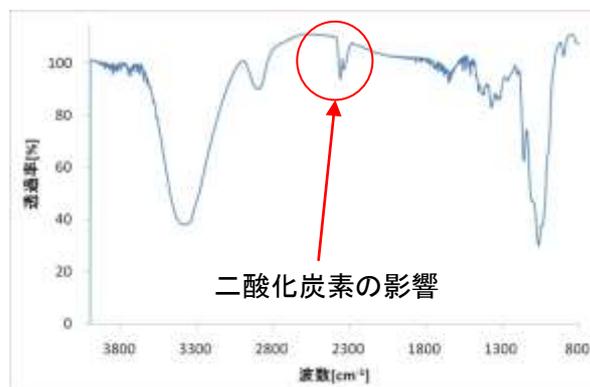
原因としてはサンプルが厚く、サンプルの透過光(反射光)とサンプル内での反射光の干渉によって発生する。これについては試料を薄くする、あるいはサンプルの表面にキズをつけて、サンプル内の反射光を散乱させることで解消できる。



油(液体)の吸収スペクトル

② 2300cm^{-1} 付近に吸収がでる。

原因としては測定雰囲気中の二酸化炭素の影響がバックグラウンドで補正しきれていないことで現れる。これについてはバックグラウンドを測定し直すことで解消できる。



紙(セルロース)の吸収スペクトル

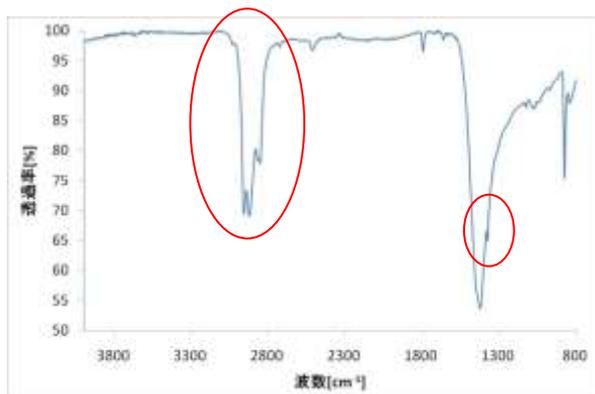
3. 混合物のスペクトル解析

日常にある有機物は単一物質のみで使用されるケースはほとんどなく、混合物として存在する。一方、FT-IR の解析で使用されるデータベースは単一物質のスペクトルしかない。よって、分析対象がデータベース中のスペクトルと一致するのは稀なケースであ

る。

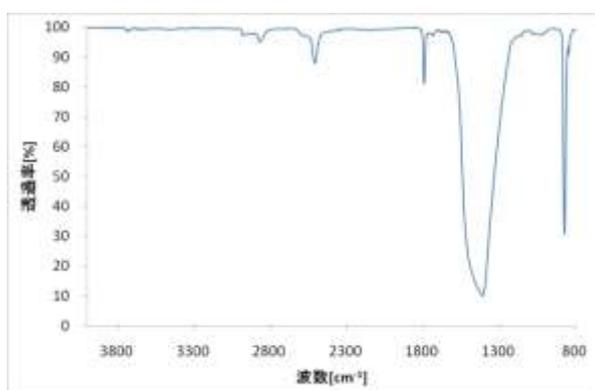
分析対象が未知試料である場合、どのような物質が含まれているかを調べるのが分析の目的となる。このため、得られたスペクトルを解析して含まれている化合物を推測しなければならない。以下に具体的な例を示す。

以下に示したのはガムテープの粘着成分のスペクトルである。



粘着成分の IR スペクトル

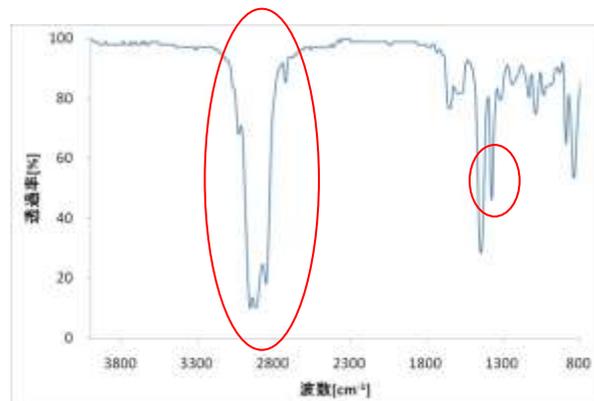
このスペクトルをライブラリと照合させると、炭酸カルシウム (Calcium carbonate: CaCO_3) がヒットする。



炭酸カルシウム (CaCO_3) の IR スペクトル

炭酸カルシウムは固体であり、粘着性はない。よって粘着成分には粘着性を付与する成分が含まれているはずである。ここで元のデータに着目すると、違いがあることが分かる。この部分に着目してライブラリと照合すると、ポリイソプレン (Poly(isoprene)) がヒットしてくる。この成分はゴム系の粘着剤に使用される

成分であり、テープに使用されてもおかしくない成分である。



ポリイソプレンの IR スペクトル

このように、「ライブラリとの照合結果 = 対象物」とはならないことに注意が必要である。

4. スペクトルの解析方法

測定結果から化合物を推測する場合、スペクトルのみの解析では間違った解釈をする場合がある。このため、スペクトル以外の情報を合わせて推測する。

① 対象の性状

測定対象が液体なのか、固体なのかは重要な情報である。固体の場合、測定時にプレスしてつぶして測定するが、この時のつぶれ方も重要な情報である。

② 混合物の可能性

見た目では色がついていれば混合物の可能性もある。また工業製品は単一物質からなることはほとんどないため、初めから混合物であると仮定して解析する。

③ 変質の可能性

環境中で使用された場合、有機物は劣化していく。その多くは酸化反応になるが、酸化反応によってスペクトルは変化してしまう(別紙 Vol.5 樹脂の熱劣化参照)。変質している可能性を考慮して解析する必要がある。

こういった解析は経験を必要とするものであるため、経験を積むしかない。解析は依頼するにしても、情報収集は必要な作業である。