

無機多孔質材料に固定された有機物の赤外分光分析

研究期間：平成29年度

研究目的

FTIR（赤外分光分析）法による有機物分析が装置価格の低下と1回反射ATR法により分析操作が簡便化となり、近年急速に企業へのFTIR装置の導入が進んでいる。本研究では、“無機多孔質材料に固定された有機物”の赤外分光分析は旧来の方法である透過法（KBr法）や標準測定法になりつつある1回反射ATR法では測定困難であることを示すとともに、簡便かつ精度よく測定する方法について検討した。

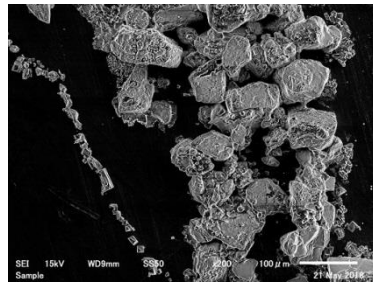
研究内容

試料としてGCカラム充填剤を選び、基質（担体）であるChromosorb Wに固定化された有機物（液相）を、透過法（KBr法）、1回反射ATR法、拡散反射（DRS）法、光音響（PAS）法でそれぞれ測定し、得られた各スペクトルをデータベース検索にかけて、ヒット率と順位を比較した。

試料として用いたGCカラム充填剤の液相

品名	液相	
	化合物名	濃度
EGS	Ethylene glycol succinate	20%
TCP	Tricresyl phosphate	20%
OVI	Dimethyl silicone gum	5%
OVI17	50% Phenyl methyl silicone	10%

担体 Chromosorb W AW 60/80mesh



Chromosorb Wの走査電子顕微鏡写真
(Chromosorb Wは白色珪藻土由来の多孔質材料)

研究成果

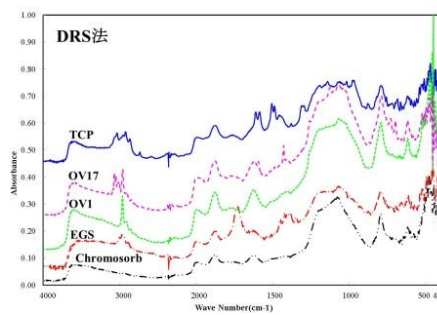
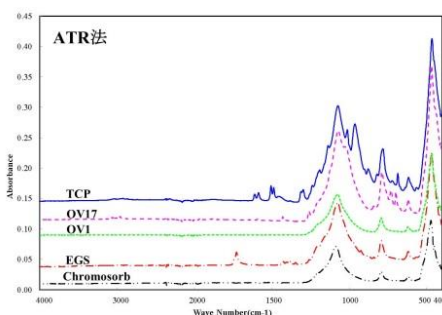
- (1) DRS法、PAS法では担体に重なった液相によるピークがKBr法、ATR法と比べて大きく、データベース検索の精度も高い。
- (2) PAS法よりDRS法の方が検索の精度が高かった。
- (3) 充填剤のスペクトルから担体のスペクトルを引いて得られる液相のみのスペクトル（差スペクトル）をデータベース検索すると検索精度が向上するが、その場合もDRS法の検索精度が最も高かった。

検索精度の比較

		補正後のデータ		差スペクトル	
		順位, ヒット率	順位, ヒット率	順位, ヒット率	順位, ヒット率
KBr法	EGS	----	1	73.71	
	TCP	1	60.17	1	78.57
	OVI	----			
	OVI17	----		8	45.26
ATR法	EGS	----			
	TCP	1	63.95	1	64.79
	OVI	----			
	OVI17	7	59.34	5	54.15
DRS法	EGS	1	50.71	1	60.65
	TCP	1	57.72	1	63.37
	OVI	2	58.35	1	59.10
	OVI17	1	59.13	1	59.86
PAS法	EGS	8	49.31	1	62.83
	TCP	4	46.49	1	57.37
	OVI	3	53.55	1	56.56
	OVI17	8	49.64	1	52.46

検索Mode:

1st Derivative Euclidean Distance



各種アクセサリを用いて測定したGCカラム充填剤と担体のIRスペクトル