

分析各类塑料 ——配套的 KnowItAll® 软件的优势——

01-00824-cn

Shoko Iwasaki

特点描述

- ◆ 傅立叶变换红外光谱仪是一种可用于确定微塑料和再生塑料成分的分析仪器。
- ◆ KnowItAll 数据库软件可以检索混合物中的多种成分，或者分析特定峰处的官能团。
- ◆ 只需点击一下，可选的 KnowItAll 配套软件就能自动从 FTIR 控制软件接收数据，以便快速进行光谱分析。

■ 引言

我们身边使用的塑料制品种类繁多。塑料重量轻、强度高且易于加工，但它们在全球范围内引发了各种各样的问题。对于解决微塑料和再生塑料相关挑战的研究而言，首先确定所涉及的塑料材料类型至关重要。在用于分析塑料的众多分析仪器中，傅立叶变换红外 (FTIR) 光谱仪尤为受欢迎，因为它们无需诸如将塑料溶解在溶剂中这样的复杂预处理步骤，就能轻松分析塑料。

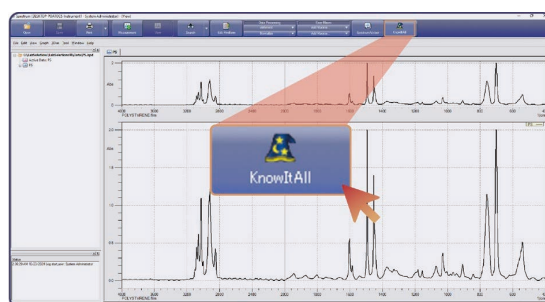
本文介绍了使用 John Wiley & Sons, Inc. 的 KnowItAll 软件进行塑料分析的情况。KnowItAll 拥有庞大的数据库，适用于多种数据分析，例如检索多种成分以识别并确定塑料中所含化学成分百分比，或者识别与特定光谱峰相关的官能团（部分结构分析）。此外，KnowItAll 与岛津 LabSolutions™ IR 主机分析软件以及 AMsolution 红外显微镜软件捆绑在一起，在岛津软件中点击 [KnowItAll] 按钮，会自动将当前活动的光谱数据发送至 KnowItAll 软件，确保快速分析。

■ 红外光谱分析

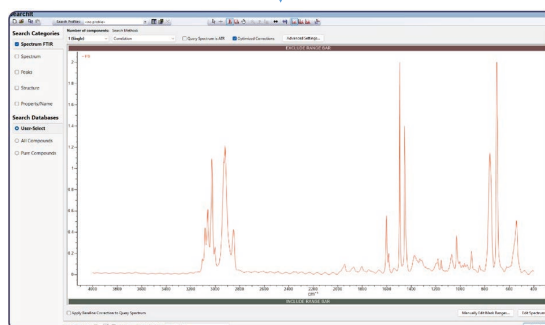
近年来，用于分析红外光谱的数据库数量不断增加，数据库检索软件的算法得到改进，且操作更加简便，因此现在任何人都能轻松检索红外光谱，并在电脑屏幕上即时显示结果。然而，如果在数据库中未找到完全匹配的光谱，在解释光谱检索结果时就可能会出现。即使找到了相似的结果，由于光谱中包含不相似的峰，也可能产生问题。因此，在这种情况下建议使用差谱 (FTIR TALK LETTER 第 22 卷)。FTIR TALK LETTER 第 24、25 和 26 卷还就如何更有效地使用 LabSolutions IR 和 AMsolution 软件中包含的标准光谱检索功能提供了建议。

除了标准功能外，对于希望自动检索多种成分或官能团的用户，推荐使用 KnowItAll 软件包 (图 1)。获取红外光谱后，只需点击 [KnowItAll] 按钮，即可自动将 LabSolutions IR 或 AMsolution 软件中处于激活状态的光谱发送到 KnowItAll 的 [SearchIt] 窗口。除了可以轻松比较红外光谱的匹配程度外，SearchIt 中的混合物分析功能还可以根据所选的成分数量对混合物进行分析。此外，ID Expert 可以评估用于检索的已加载红外光谱的质量。Analyzelt 可以显示点击的峰的所有官能团列表。

虽然此处未展示，但上述针对红外光谱的数据的分析和评估功能同样适用于拉曼光谱。



点击 LabSolutions IR 中的 [KnowItAll] 按钮。



数据会自动发送至 KnowItAll 中的 SearchIt (标准光谱分析功能)。

KnowItAll 包含的关键功能

- 用于分析混合物的混合物分析功能
- 用于分析光谱的 ID Expert 功能
- 用于分析官能团的 Analyzelt 功能
- 构建光谱数据库功能
- 创建报告等功能

图 1 KnowItAll 软件包 (与 LabSolutions IR 集成的功能示例)

■ 使用的仪器和测量参数

使用了安装 QATR™ 10 单次全反射附件 ATR 的 IRXross 傅立叶变换红外光谱仪。如图 2 所示，测定参数列于表 1。



图 2 配备 QATR 10 附件的 IRXross™ 傅立叶变换红外光谱仪

表 1 测定参数

仪器:	IRXross 和 QATR 10 (金刚石)
分辨率:	4 cm ⁻¹
扫描次数:	45
变迹函数:	SqrTriangle
检测器:	DLATGS

■ 微塑料的分析——官能团分析

微塑料对河流和海洋的污染发生在全球范围内，引发了人们对微塑料如何影响生物体的担忧。近年来，针对微塑料开展了各类监测调查和研究，比如它们在全球的分布情况。下面介绍使用单次衰减全反射 (ATR) 法分析微塑料的过程。所获取的红外光谱及相应的谱库检索结果如图 3 所示。使用岛津标准谱库确定该材料为聚丙烯 (PP)。然而，在 3600 至 3100 cm⁻¹ 波数范围、1700 cm⁻¹ 附近以及 1300 至 1000 cm⁻¹ 波数区域存在与谱库数据不匹配的峰。因此，使用了配套 KnowItAll 软件中的 Analyzelt 来检索相应的官能团。首先，确认 PP 峰归属的结果如图 4 所示。通过官能团分析，可以确定官能团信息、峰的范围、峰强度以及振动模式。根据光谱上显示的预测峰位置，可以轻松确认不同的峰。然后，依次选择与 PP 不匹配的峰，以显示相应的参考结果 (图 5)。由此推断，3600 至 3100 cm⁻¹ 区域的峰来自 O-H 基团，1700 cm⁻¹ 附近以及 1300 至 1000 cm⁻¹ 的峰来自 C=O 和 C-O 基团。鉴于这些官能团在 PP 结构中并不存在，这表明它们是由 PP 降解 (变性) 导致的红外光谱图变化所引起的。

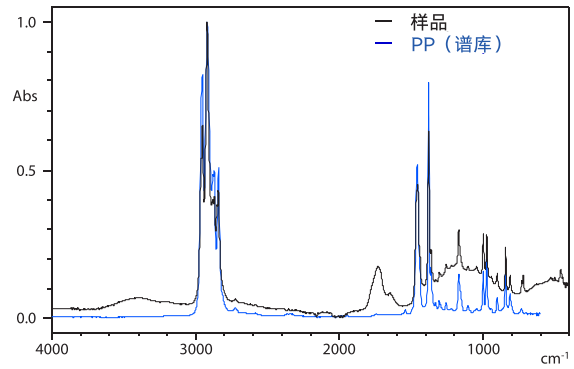


图 3 使用标准谱库的检索结果

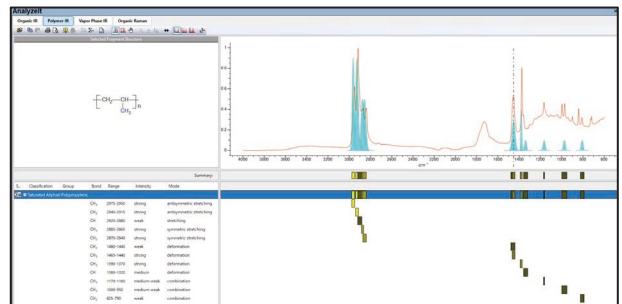


图 4 KnowItAll 软件包: 官能团分析结果 (PP)

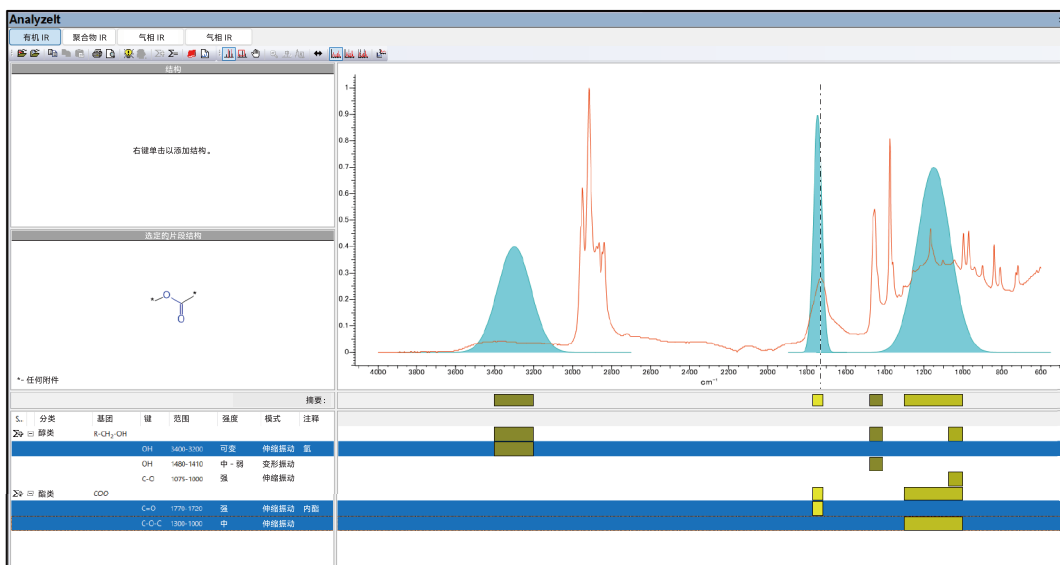


图 5 KnowItAll 软件包: 官能团分析结果 (针对与 PP 不匹配的峰)

岛津提供了一个专有谱库，即紫外线降解塑料谱库，该谱库收录了因紫外线照射而降解的塑料的红外光谱。它包含了 14 种塑料的相关信息，以及使用加速老化人工环境气候箱 (岩崎电气株式会社) 对暴露在紫外线下长达 550 小时 (相当于约 10 年的紫外线照射时长) 的样品所采集到的红外光谱。由于该谱库适用于微塑料的分析，因此在检索中使用了它。检索结果 (图 6) 显示，经过 150 小时紫外线照射的 PP 的红外光谱与所采集到的光谱相似，这证实了该样品是降解后的 PP。

这表明，任何分析人员都可以使用岛津的专有谱库轻松地对微塑料进行分析。



图 6 紫外线降解塑料谱库检索结果

再生塑料的分析——多组分分析

再生塑料并非由单一组分组成，而是多种材料的复合物。因此，对含有两种或更多种组分的塑料进行红外光谱分析可能会非常复杂。例如，聚碳酸酯（PC）和丙烯腈-丁二烯-苯乙烯聚合物（ABS）的共聚物兼具 PC 和 ABS 聚合物的优点。它们被广泛应用于各种领域，比如用于需要具备抗冲击性、耐热性和优异成型性的汽车内饰部件，办公设备，甚至由于其作为电绝缘材料的优异性能而被用于电气部件。

因此，使用了配套 KnowItAll 软件中的 ID Expert，对通过单次衰减全反射（ATR）法从一种再生 PC/ABS 材料测得的数据进行分析。能自动显示从单一组分到多种组分的所有检索结果（图 7）。对于多种组分，ID Expert 可以根据检索结果中的谱库光谱合成一个复合光谱，并根据测量数据显示残差光谱。此外，这些光谱还可以与未通过 SearchIt 数据分析计算得出的峰检索或官能团分析结果相关联。

它还可以通过最优光谱拟合计算出 PC 与 ABS 的比例（0.38:0.62）。

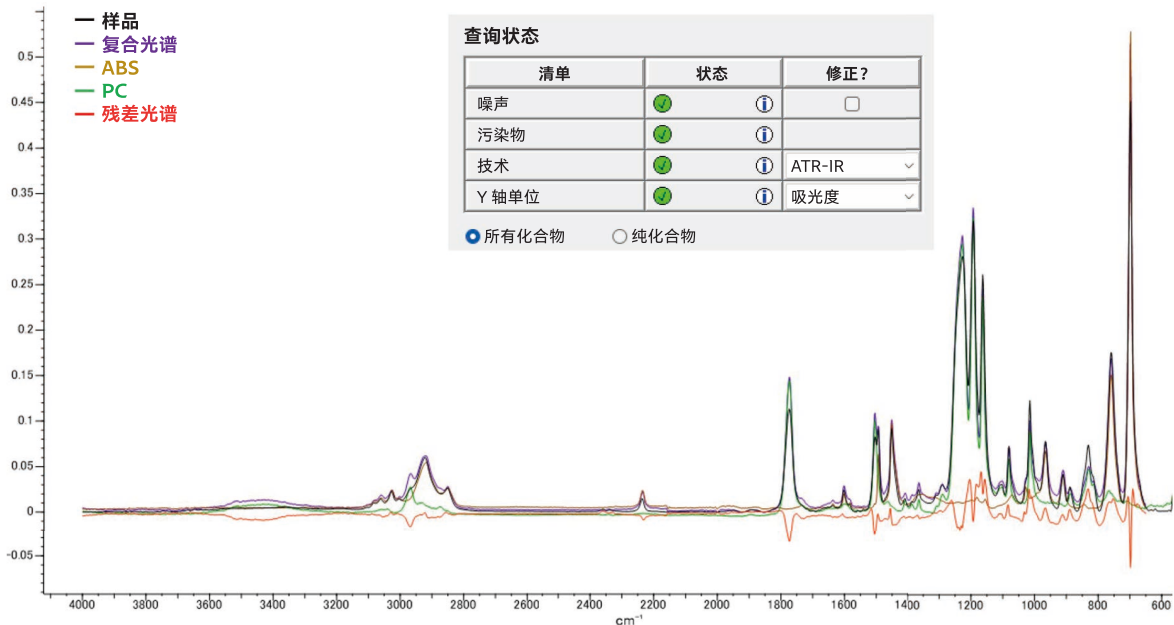
然而，这些比例是根据红外光谱面积比计算得出的，并未考虑所涉及物质的摩尔吸收系数，这可能会与实际比例（PC:ABS = 0.25:0.75）存在差异。因此，在使用这些比例数值时需要谨慎。

此外，ID Expert 可以自动判断 * 红外光谱中是否存在噪声（基于估算的信噪比数值）以及污染物（定义为大气中的水蒸气或二氧化碳）。它还具备重复检索的功能。

* 通过选择图 7 中插入的 [状态] 字段，高噪声或高污染物水平会以红色或黄色标示出来。

结论

红外主机和衰减全反射（ATR）附件相结合，可以对多种塑料进行测定。然而，分析人员必须能够判断软件数据分析结果是否正确，这需要大量的知识和经验。但是，使用本文中所介绍的 KnowItAll 软件包，能够轻松分析特定峰的官能团或多种成分，为提高数据分析的准确性提供了一种有效的方法。



单组分结果	双组分结果	三组分结果	四组分结果	峰结果	官能团
评分 90.45	信息比例 N.A.	名称 复合光谱	化学结构 <chem>C1=CC=C(C=C1)C(C)C(C)C(C)C</chem>	光谱	复合光谱
	0.62	聚(丙烯腈-丁二烯-苯乙烯)	<chem>C1=CC=C(C=C1)C(C)C(C)C(C)C</chem>		ABS
	0.38	DFL-4038			PC
	N.A.	残差光谱			残差光谱

图 7 KnowItAll 软件包：ID Expert 检索结果

岛津应用云



LabSolutions、IRXross、AIMSight、AIRSight 和 QATR 是岛津制作所或其附属公司在日本和 / 或其他国家 / 地区的商标。KnowItAll 是 John Wiley & Sons, Inc. 在美国、英国、欧盟和中国的注册商标。



岛津企业管理（中国）有限公司
岛津（香港）有限公司

<http://www.shimadzu.com.cn>

用户服务热线电话：800-810-0439
400-650-0439

免责声明：

* 本资料未经许可不得擅自修改、转载、销售；
* 本资料中的所有信息仅供参考，不予任何保证。
如有变动，恕不另行通知。

第一版发行日：2025 年 1 月