



# KnowItAll

## マイクロプラスチックの分類

Michelle D'Souza, Ph. D.

Graeme Whitley

Natalie Clines

Keith Kunitsky

Gabrielle Bethancourt-Hughes

Zille Huma

Wiley Science Solutions

# 目次

<b>はじめに</b> .....	<b>3</b>
<b>方法</b> .....	<b>4</b>
IR .....	4
ラマン .....	4
<b>結果と考察</b> .....	<b>5</b>
IRマイクロプラスチックの分類とクラス分け .....	5
US EPAデータセット .....	5
サウサンプトン大学 .....	6
Open Specy (IR/ATR-IR - 636 スペクトル) .....	6
未知のマイクロプラスチックの分類および識別のためのSpectroscopy (分光法) エディションの使用例 .....	7
<b>まとめ</b> .....	<b>11</b>
<b>参考資料</b> .....	<b>12</b>

# はじめに



マイクロプラスチックはいたるところに存在しています<sup>1-3</sup>。研究によると、種を超えて生活に大きな影響を与えることがわかっています。最近、環境サンプルの分類・識別が注目されています。一般的な方法としては、IR/ラマン分光法の技術の応用があります<sup>2,4,5</sup>。これらの技術は、マイクロプラスチックの親であるポリマーの分析に有効であることが証明されています。しかし、サンプルを収集して未知の比較のために信頼性の高い参照スペクトルデータベースを作成することは容易ではありません。スペクトル分析組織は、この課題を解決するためには、素早く、簡単に、そして低コストのツールを提供する必要があります。

典型的なマイクロプラスチックのIRスペクトル<sup>4,5</sup>と、KnowItAll IRスペクトルライブラリ<sup>6,7</sup>に掲載されている親ポリマーのIRスペクトルを目視で比較した結果、マイクロプラスチックのIRスペクトルは似たような特徴を持っていると考えられました。そこで、特許技術であるODHM (オーバーラップ密度ヒートマップ) を用いて、「分類スペクトル」を導き出しました。私たちの研究では、これらの分類スペクトルが、未知のマイクロプラスチックの分類に使用できることを示唆しています。Wiley社が提供している膨大なKnowItAll IRデータベースと組み合わせることで、マイクロプラスチックを識別することができます。

また、マイクロプラスチックのラマンスペクトルを親ポリマーのそれと比較できるという研究結果もあります<sup>2</sup>。マイクロプラスチックの識別には、最大のコレクションであるKnowItAllラマンスペクトルライブラリ<sup>6,7</sup>を使用することをお勧めします。

## IR

IRマイクロプラスチック分類スペクトルデータベースは、特許取得済みのODHM技術を使用して作成されました。現在、拡張可能な次のクラスがあります。

- ポリエチレン (IRおよびATR-IR)
- ポリアクリレート (IR)
- ポリアミド (IRおよびATR-IR)
- ポリカーボネート (IRおよびATR-IR)
- ポリプロピレン (IRおよびATR-IR)
- ポリスチレン (IRおよびATR-IR)
- ポリ塩化ビニル (IRおよびATR-IR)
- 塩素化ポリ塩化ビニル (IR)
- ポリエステル (IR)

IRマイクロプラスチックの分類データベースを評価するために、米国EPA<sup>8</sup>、サウサンプトン大学<sup>9</sup>、OpenSpecy<sup>10</sup>などのオープンソースからマイクロプラスチック検査データセット (IRおよびラマン) を入手しました。クラス分けや分類が研究されています。また、実際のプラスチックデータベースのスペクトルと組み合わせて使用される分類スペクトルの効果についても研究されています。

## ラマン

様々なクラスのプラスチックのラマンスペクトルを検討した結果、プラスチックのクラスごとに分類スペクトルを構築することは困難であると結論づけました。Wileyラマンスペクトルのコレクションは比較的小規模で安価なため、既存のラマンデータコレクションを利用してマイクロプラスチック<sup>8</sup>を識別することができます。

# 結果と考察

相関アルゴリズムを用いて、3つのテストデータセットのマイクロプラスチックのスペクトルを、IRマイクロプラスチックの分類データベースと比較しました。サンプルのスペクトルに存在する二酸化炭素や水蒸気のピークは、スペクトルの比較から除外しました。一致は、良好なピークアラインメントとヒット品質インデックス (HQI) 値によって判断されました。以下にその研究結果を紹介します。

## US EPAデータセット

IR: 89スペクトル、11タイプ

ラマン: 60レコード

マイクロプラスチックのクラスごとに複製されたIRサンプルがありますが、その中から1例を選んで報告します。ヒット間で良好なHQI値とピークアラインメントが観察されました(表1)。また、2番目のヒットクラスでは、分離が良くてもピークアラインメントが悪いことが観察されました。(https://catalog.data.gov/dataset/isotope-ratio-mass-spectrometry-irms-and-spectroscopic-techniques-for-microplastic-charact)

表1 - マイクロプラスチック分類スペクトルをテストするためのEPAデータセット

マイクロプラスチックサンプル	1 <sup>st</sup> ヒットピークアラインメント	1 <sup>st</sup> ヒットHQI	1 <sup>st</sup> ヒット分類	次のクラスのHQI
ブラウンの蓋	優良	86.99%	ポリエチレン	51.41%
ポリカーボネート_bally-hoo	優良	53.09%	ポリカーボネート	49.97%
Nylon6.0	優良	67.91%	ポリアミド	45.24%
黒のスパイスジャーの蓋	優良	83.90%	ポリプロピレン	62.03%
EPS	優良	93.37%	ポリスチレン	35.40%
ポリエステルスカーフ	優良	67.33%	ポリエステル	51.84%
Pvc_AWBERC.0	優良	74.01%	ポリ塩化ビニル	33.85%

## サウサンプトン大学

### IR - 2,675 スペクトル

どのサンプルスペクトルにも、特定のクラスのラベルは付いていませんでした。反復サンプリングでは、テスト用に反復スペクトルの1つを選択しました。その結果を表2に示します。

表2 - マイクロプラスチック分類スペクトルをテストするためのサウサンプトンのサンプル

マイクロプラスチックサンプル	1 <sup>st</sup> ヒットピークアライメント	1 <sup>st</sup> ヒットHQI	1 <sup>st</sup> ヒット分類	次のクラスのHQI
SHWIRMP #867、 管理者16	優良	91.16%	ポリエチレン	61.00%
SHWIRMP #1498、 管理者477	優良	77.99%	ポリアミド	50.64%
SHWIRMP #2419、 管理者151	優良	89.02%	ポリプロピレン	66.83%
SHWIRMP #2043、 管理者720	優良	84.59%	ポリスチレン	46.05%
SHWIRMP #1558、 管理者537	優良	83.53%	ポリエステル	61.63%

## Open Specy

### IR/ATR-IR - 636 スペクトル

このデータベースに収録されているスペクトルのほとんどはATR-IRです。多くのサンプルのスペクトルは互いに似ています。これらのケースでは、テスト用のために1つのスペクトルを選択しました。表3に示すように、スペクトルは効果的に分類されました。

表3 - マイクロプラスチックの分類スペクトルをテストするためのOpenSpecyサンプル

マイクロプラスチックサンプル	1 <sup>st</sup> ヒットピークアライメント	1 <sup>st</sup> ヒットHQI	1 <sup>st</sup> ヒット分類	次のクラスのHQI
ポリエチレンワックス #285	優良	90.00%	ポリエチレン	50.97%
PET #292	優良	79.73%	ポリエステル	61.25%
ポリカーボネート #406	優良	77.29%	ポリカーボネート	44.54%
ポリスチレンエキスパンデッド #333	優良	92.33%	ポリスチレン	36.41%
ポリプロピレン #411	優良	92.71%	ポリプロピレン	61.97%

# 未知のマイクロプラスチックの分類および識別のためのSpectroscopyエディションの使用例：

マイクロプラスチックの分析が急務であることから、KnowItAll Spectroscopyエディションにはマイクロプラスチック分類スペクトルデータベースが含まれているため、ユーザーは環境にとって重要な研究分野に即座に影響を与えることができます。

図1. - IR - EPS.0\_マイクロプラスチック

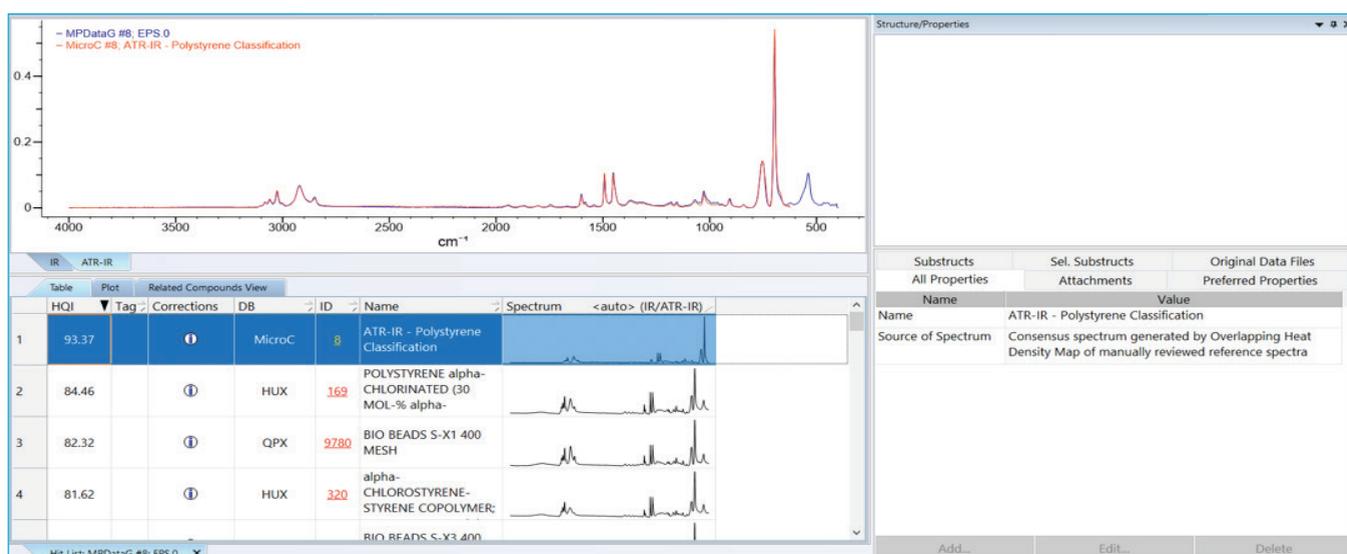
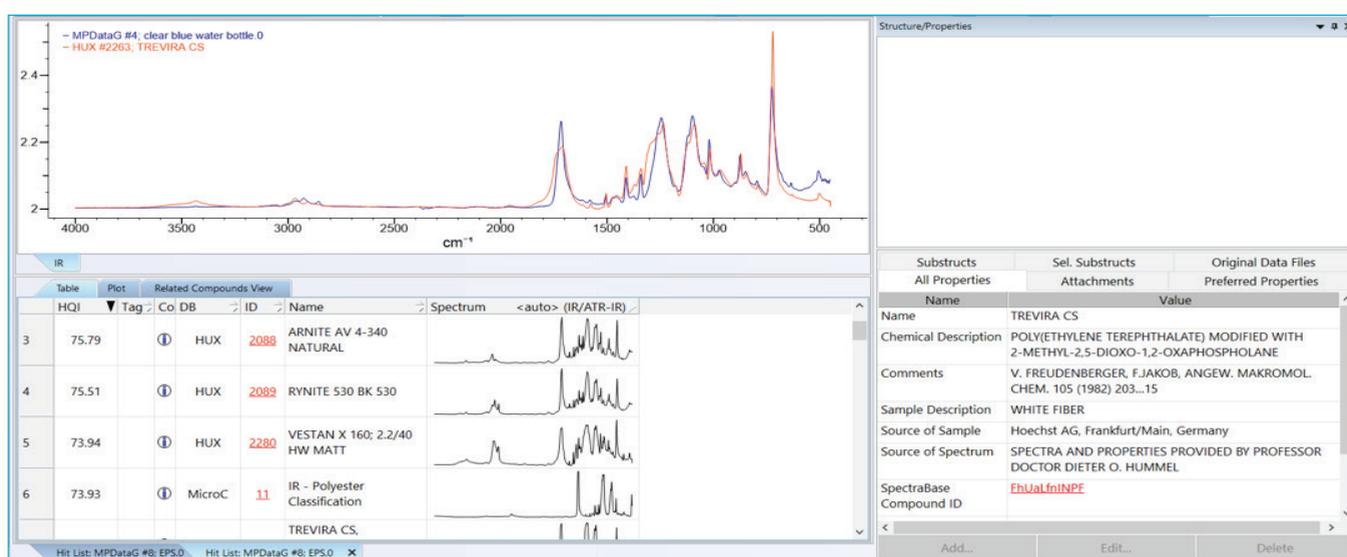


図2. IR - クリアブルーウォーターボトル\_マイクロプラスチック



この場合、サンプルのスペクトルは市販のポリマー製品のものと最もよく一致します。しかし、ポリマーを簡単に特定することはできません。分類スペクトルの一致は6番目のヒットで、未知の親をポリエステルとして分類しています。

図3a. IR - ブラウンリッド\_マイクロプラスチック

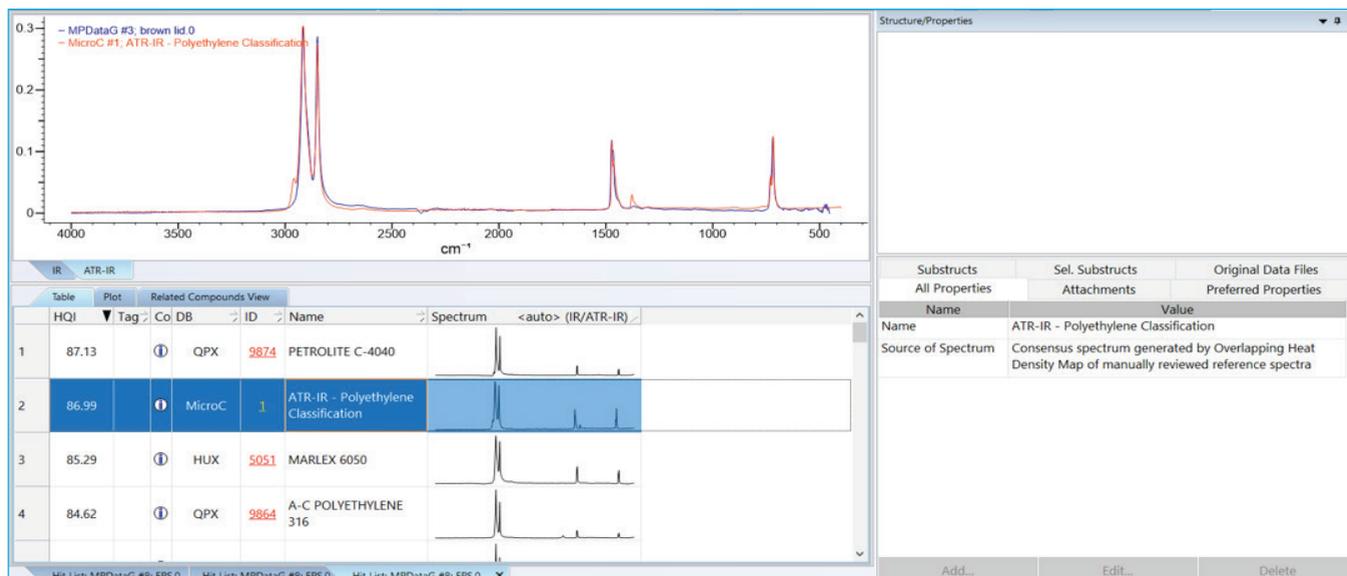
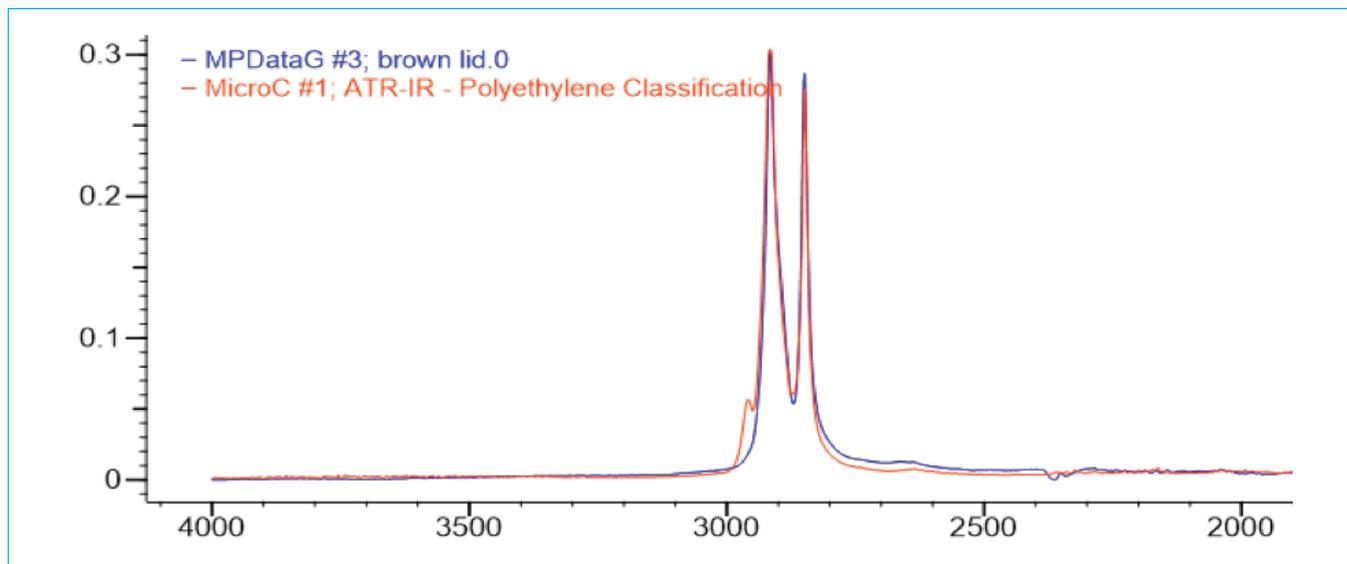
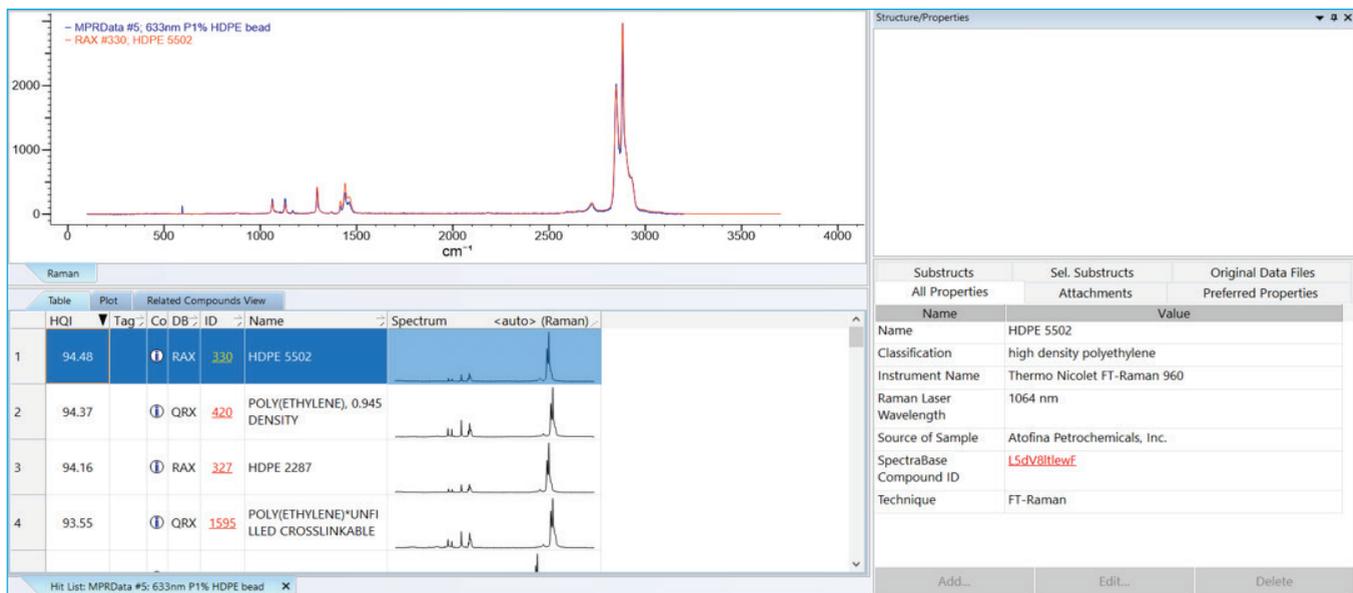


図3b. IR - 3aの詳細 - ブラウンリッド\_マイクロプラスチック



繰り返しになりますが、無名のものを商品名に同定してもほとんど意味がありません。マイクロプラスチックのスペクトルでは、この例の親化合物はポリエチレンに分類されます。

図4. ラマン - HDPEビーズ\_マイクロプラスチック



ラマンマイクロプラスチックサンプルは、経済的かつ正確にマッチングするWileyラマンスペクトルデータベースによって識別できます。

図5a. ラマン - PSクリア\_マイクロプラスチック

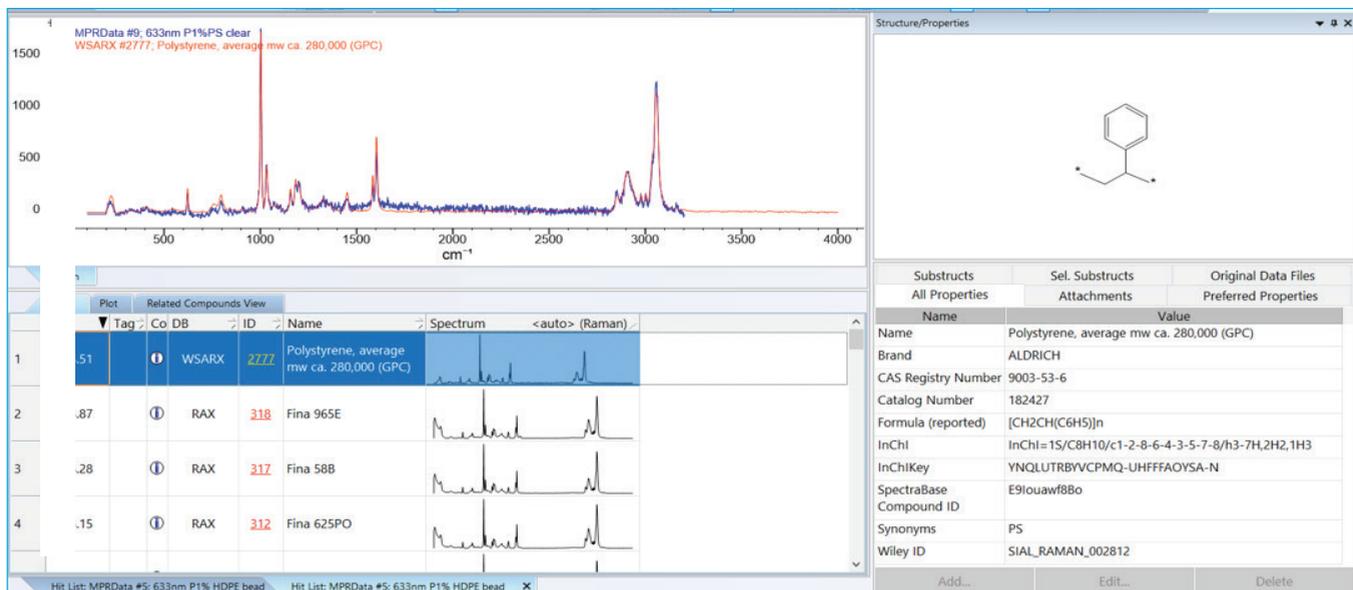
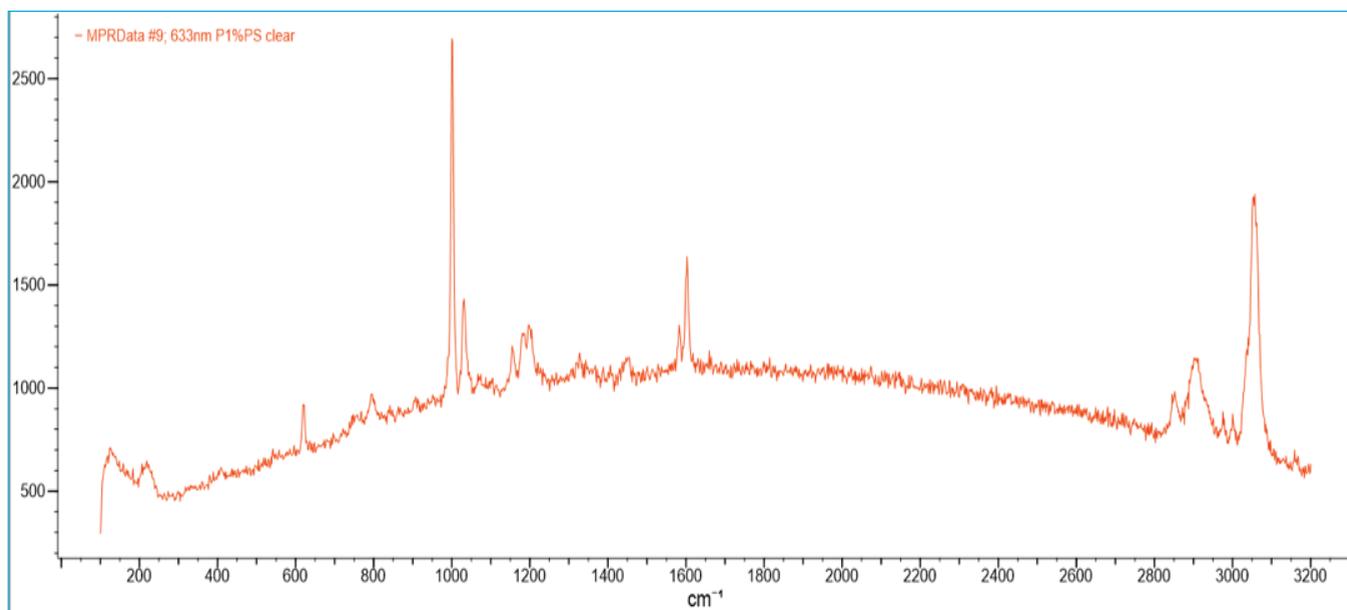


図5b. ラマン - 悪いベースライン



オリジナルのマイクロプラスチックサンプルはベースラインが悪いのですが(図5b)、KnowItAllの最適化を用いた補正(図5a)ではこれは問題になりません。

# まとめ

分類スペクトルを用いたIR/ATR-IRマイクロプラスチック分類は、未知のマイクロプラスチックIRサンプルを分類するのに有効な方法であることがわかりました。検索結果は、実務者が分類に自信を持てるように、クラス間のHQI値に十分な差があります。「IRマイクロプラスチック分類データベース」では、瞬時に結果が返ってきます。

マイクロプラスチック分類データベースは、KnowItAll Spectroscopyエディションの2021年メンテナンスリリースで利用可能であり、現在のサブスクリイバーすべてに新機能として提供されます。これにより、すべてのユーザーが効率的かつ効果的な方法でマイクロプラスチックの汚染に対処できるようになります。より包括的なマイクロプラスチックの識別を行う必要がある場合は、より包括的なIRおよびラマンのコレクションへのサブスクリプションの追加を検討する必要があります。

1. National Oceanic and Atmospheric Administration. What are microplastics? <https://oceanservice.noaa.gov/facts/microplastics.html> (accessed 9 September 2021).
2. Sh.R. Pozdnyakov, E.V. Ivanova, A.V. Guzeva, E.P. Shalunova, K.D. Martinson, D.A. Tikhonova. (2020). Studying the concentration of microplastic particles in water, bottom sediments and subsoils in the coastal area of the Neva Bay, the Gulf of Finland. *Water Resources* 47(4): 599–607. <https://doi.org/10.1134/S0097807820040132>
3. S. Selvam, A. Manisha, S. Venkatramanan, S.Y. Chung, C.R. Paramasivam, C. Singaraja. (2020). Microplastic presence in commercial marine sea salts: A baseline study along Tuticorin Coastal salt pan stations, Gulf of Mannar, South India. *Marine Pollution Bulletin* 150: 110675. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2019.110675>
4. M.G.J. Löder and G. Gerdtts (2015). Methodology Used for the Detection and Identification of Microplastics—A Critical Appraisal. In: Bergmann M., Gutow L., Klages M. (eds) *Marine Anthropogenic Litter*. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-16510-3\\_8](https://doi.org/10.1007/978-3-319-16510-3_8)
5. S. Tagg, J.P. Harrison, Y. Ju-Nam, M. Sapp, E.L. Bradley, C.J. Sinclair, J.J. Ojeda. (2017). Fenton’s reagent for the rapid and efficient isolation of microplastics from wastewater. *Chem. Commun.* 53: 372–375. <https://doi.org/10.1039/C6CC08798A>
6. KnowItAll Software (version 2021). John Wiley & Sons, Inc. Hoboken, NJ (2021). [Computer Software]
7. KnowItAll IR & Raman Spectral Libraries. John Wiley & Sons, Inc. Hoboken, NJ (2021). [Computer Software]
8. Isotope ratio mass spectrometry (IRMS) and spectroscopic techniques for microplastic characterization. (2021) U.S. EPA Office of Research and Development (ORD). <https://catalog.data.gov/dataset/isotope-ratio-mass-spectrometry-irms-and-spectroscopic-techniques-for-microplasticcharact> [Dataset]
9. Stead, Jessica, Laura (2021) Data: FTIR spectra for particles in subsampled water samples from Southampton Water and analysed for microplastic content. University of Southampton doi:10.5258/SOTON/D1892 [Dataset]
10. Cowger W, Steinmetz Z, Gray A, Munno K, Lynch J, Hapich H, Primpke S, De Frond H, Rochman C, Herodotou O (2021). “Microplastic Spectral Classification Needs an Open Source Community:Open Specy to the Rescue!” *Analytical Chemistry*, 93(21), 7543–7548. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c00123> [Dataset]