

# 顕微赤外イメージング法における多変量解析手法の向上

藤巻 康人<sup>\*1)</sup>、島田 勝広<sup>\*2)</sup>

## 1. はじめに

中小企業からの依頼が多い材料表面分析では、成分の分布状態を知るために顕微赤外イメージング法や顕微ラマンマッピング法などの各種マッピング技術が用いられることが多い。マッピングデータの解析には、しばしばケモメトリックス（多変量解析）が用いられているが、ケモメトリックスは「ブラックボックス」とも揶揄されるほど解析のアルゴリズムが難解であるために、使い手に有利な結果を無意識に選び出してしまいう危険性が高い。本研究では、代表的な材料表面分析技術である顕微赤外イメージング法によってマッピングデータを取得し、最適なスペクトル前処理や解析アルゴリズムを比較検討することで、材料表面分析におけるケモメトリックス手法の向上を図る。

## 2. 実験方法

図1に示すようなアルミ円板上に、スピコーターを用いて樹脂の薄膜を作製した。樹脂はポリ酢酸ビニル(PVAc)、アクリル樹脂(PMMA)、ポリスチレン(PS)の3種を用いた。実際の材料表面分析における未知成分の分散状況を想定し、3種の樹脂のさまざまな組み合わせによって複雑な系でのモデル試料を作製した。顕微イメージング測定は、試料上の $200\mu\text{m} \times 200\mu\text{m}$ の領域を走査し、 $16 \times 16 = 256$ のスペクトル情報を取得した。



図1 測定試料

## 3. 結果・考察

従来、単成分のときは成分に特徴的な波数を選んでイメージングすることが可能であった。しかし図2に示すような多成分系においては、従来のイメージングでは成分に特徴的な波数を選んだつもりでも実際はピークが重なってしまうため、正確なケミカルイメージを得ることができない。多成分系での分布状態を見るためには、各成分に特徴的な波数を選び直す必要がある。

今回、顕微イメージング法に多変量解析を用いる手法を比較検討することにより、従来の単波数のマッピングでは不可能だった多成分系の成分分布を視覚化することができた(図3)。また、未知成分でも他の成分と誤認することなく、適切に分類することができた。今後はさらなる解析精度の向上や定量分析への応用などが期待できる。

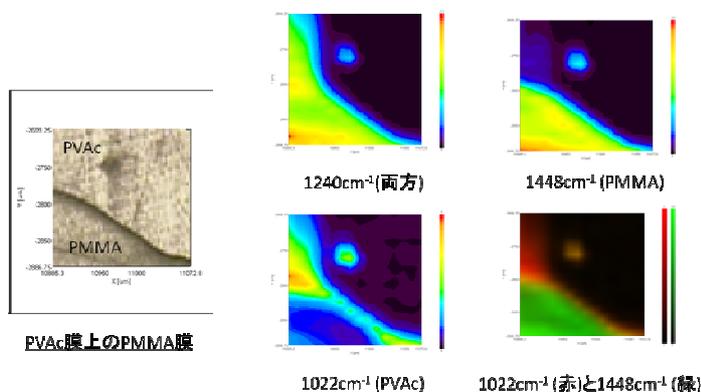


図2 単波数強度によるマッピング

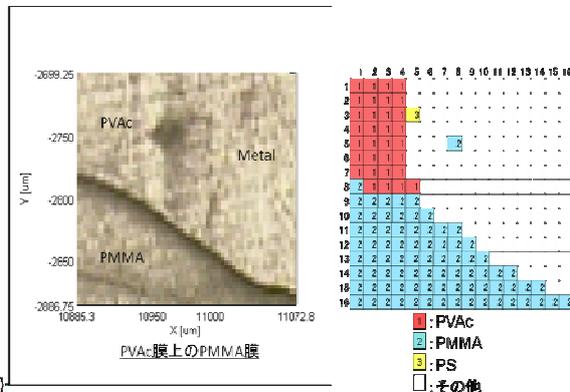


図3 多変量解析手法によるケミカルイメージ

<sup>\*1)</sup> 城東支所、<sup>\*2)</sup> 技術経営支援室