

遠紫外分光法によるミネラルウォーターの分析 ー各種イオン間の相関と定量原理についてー

技術の特徴

- 250～175nmの遠紫外スペクトルによって、市販のミネラルウォーター中のいくつかのイオン種の溶存量の推定が可能¹⁾であるが、この帯域にはこれらのイオンの直接的な吸収バンドは存在せず、Cl⁻のCTTSバンドや、水の第一電子遷移吸収帯の裾が観測される²⁾。
- 不活性イオン種の定量ができた理由として、天然物ならではの組成比に着目し、各種イオン間の相関解析により、遠紫外域で直接観測される吸収バンドとの関連を調べた。

研究の内容

- 170～250nmの遠紫外スペクトルを測定(図1)
- 試料は市販のミネラルウォーター7種類
- 参照値のイオン濃度の測定にはICP-AES およびイオンクロマトグラフを使用
- 各種イオン濃度の相関解析(図2)
- 相関の高いイオン種のPLSR検量モデル(図3)

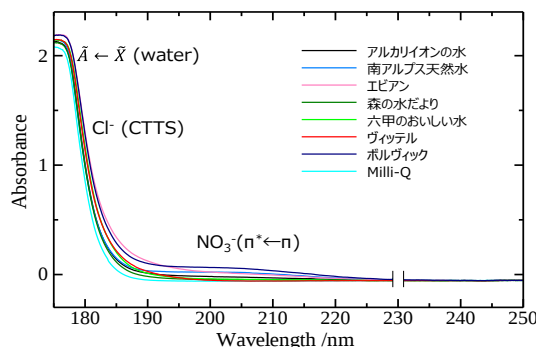


図1 ミネラルウォーターの遠紫外透過スペクトル

	硬度	Na ⁺	Ca ²⁺	Mg ²⁺	K ⁺	F ⁻	Cl ⁻	Br ⁻	NO ₂ ⁻	NO ₃ ⁻
硬度	1									
Na ⁺	-0.45	1								
Ca ²⁺	0.99	-0.45	1							
Mg ²⁺	0.96	-0.41	0.93	1						
K ⁺	0.14	-0.29	0.17	0.09	1					
F ⁻	-0.09	-0.10	-0.10	-0.05	0.78	1				
Cl ⁻	0.07	0.48	0.01	0.24	0.19	0.17	1			
Br ⁻	0.08	0.71	0.11	0.04	0.26	0.24	0.49	1		
NO ₂ ⁻	0.29	0.33	0.22	0.47	0.13	0.14	0.96	0.39	1	
NO ₃ ⁻	-0.15	-0.23	-0.20	0.02	0.39	0.35	0.54	-0.27	0.49	1

図2 各種イオン濃度の相関解析

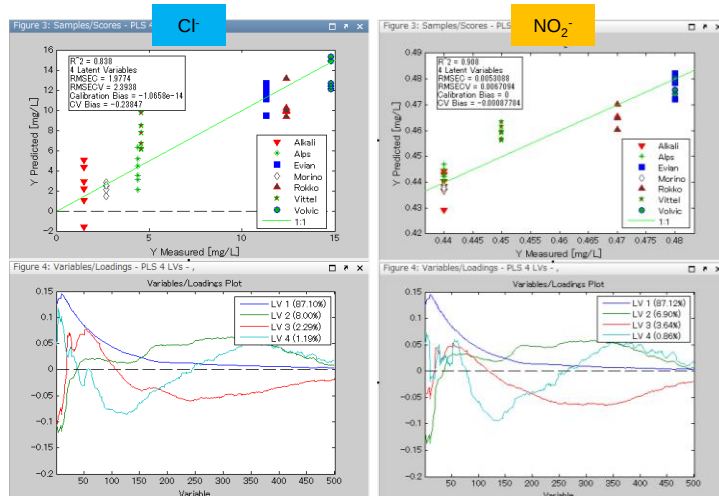


図3 相関の高いイオンのPLSR検量モデル

- 紫外・遠紫外で推定可能なイオン: NO₃⁻, Cl⁻, Mg²⁺, Ca²⁺
- 紫外・遠紫外で推定できる可能性があるイオン: Na⁺, Br⁻
- 遠紫外でのみ推定できる可能性があるイオン: F⁻, NO₂⁻
- 紫外・遠紫外とも推定困難: SO₄²⁻, PO₄²⁻, K⁺

今後の展開

- サンプルを増やして本手法の有効性を検証する

参考

- 池羽田晶文, 進藤久美子, 遠紫外分光法を利用したミネラルウォーターの分析, 第74回分析化学討論会 (2014).
- T. Goto *et al.*, The effect of metal cations on the nature of the first electronic transition of liquid water as studied by attenuated total reflection far-ultraviolet spectroscopy, *PCCP*, **14**(22), 8097-8104 (2012).
- 池羽田晶文ほか, 遠紫外分光法による水及び水溶液の分析, 分析化学, **60**(1), 19-31 (2011).
- Y. Ozaki and S. Kawata, *Far- and Deep-Ultraviolet Spectroscopy*, Springer (2015).