

## 近赤外分光法による品質管理

キーワード：近赤外分光法、品質管理、繊維、アミノシリコン系柔軟剤、定量

### はじめに

近赤外分光法は試料に近赤外光（800～2500 nm）を照射して得られる吸収スペクトルを用いて定性・定量分析を行なう方法です。この方法は、たとえば、水分量の測定、農産物の食味、プラスチックの判別など、食品や医薬品、化学品などの品質検査においては広く利用されています。

本稿ではこの近赤外分光法の概要を述べるとともに、繊維分野の品質管理として繊維柔軟剤（アミノシリコン系）の付着量について検討した事例を紹介します。

### 近赤外分光法の概要

近赤外分光法で使用される波長域で生じる光吸収は中赤外（IR）領域の基準振動の倍音や結合振動によって起こります。その吸収は主としてC-H、O-H、N-H、C=Oなどの結合によるものであり、これによって、有機化合物の成分をとらえることができます。他方、その吸収強度は弱く、各種の結合基の倍音振動や結合振動が相互に重なり合い、複雑でブロードなスペクトルを示します。しかし、吸収が弱いということは厚い試料を直接測定でき、生産工程の製品をそのまま測定試料とすることができるという利点になるので、近赤外分光法は化学分析よりも主に品質管理に応用されています。

さらに、近赤外分光法は非破壊分析法であり、従来の化学試験のように薬品を使用せず環境負荷や安全性の点で優れているだけでなく、迅速な測定、多成分同時分析は勿論のこと、分析のオンライン化も可能であるといった利点があります。このように近赤外分光法ではそのスペクトルは赤外スペクトルのようなピークの帰属による利用というより、主に「ケモメトリクス」という統計演算処理を用いて定量分析を行

う方法が利用されています。この方法では、従来試験によるデータと近赤外スペクトルの多変量解析により検量線を作成し、別の既知試料を測定してこの検量線が正しいかを評価した後、以後はスペクトル結果から試料の特定成分の含有率を求めることができます。

### 綿布上のアミノシリコン系柔軟剤付着量の定量

アミノシリコン系柔軟剤を用いて綿布を標準レサイプの1/5～5倍の濃度で柔軟加工した後、その近赤外スペクトルを測定しました。付着量はアミノシリコン溶解除去剤による処理での減少重量より求めました。図1は処理濃度を変えたアミノシリコン系柔軟加工綿布のスペクトルであり、図2はその2次微分スペクトルです。2次微分処理することにより各々のスペクトルの特徴が強調され、スペクトルの比較が容易になります。2次微分スペクトルにおいて1190、2294、2372 nmにアミノシリコン系柔軟剤に基づく明確な差が見られたので、これら3波長の吸光度と減少重量により求めた付着量との間で重回帰分析を行なったところ、図3の相関関係を得ました。このときの相関係数は0.96でした。

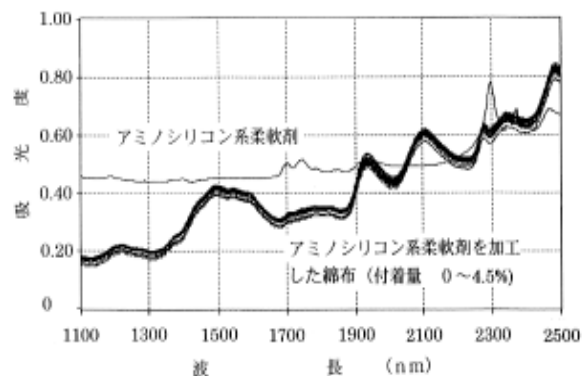


図1 アミノシリコン系柔軟剤加工綿布の近赤外スペクトル

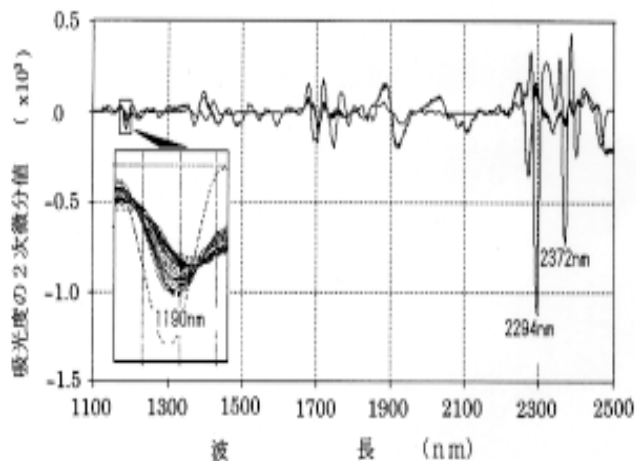


図2 図1の2次微分スペクトル

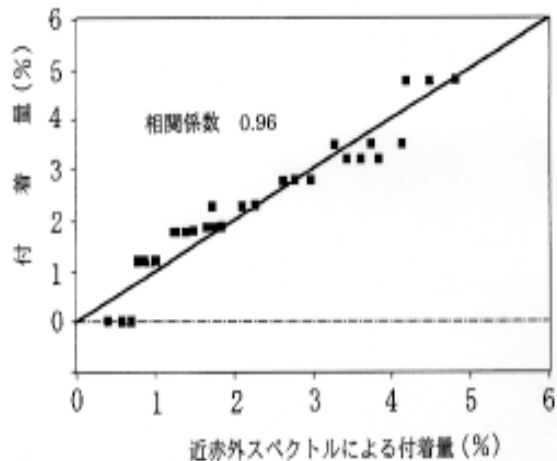


図3 アミノシリコン系柔軟剤の付着量と近赤外スペクトルの相関

**まとめ**

このように近赤外分光法は付着量や表面倦態のばらつきのため測定上有利ではない繊維試料においても、加工剤の0.1～数%の付着量の定量に十分対応することができました。試料が均質で、定量目的物質の近赤外領域での吸収強度が大きく、化学構造が母材と異なる場合にはさらに有利になります。

この他の応用として、当研究所では塩化ビニル中の熱安定剤や可塑剤の定量分析に成功しており、今後、このような加工剤の混合割合の測定だけでなく、フェノール樹脂の硬化過程における硬化度の管理など、化学反応の管理への応用も企画しています。

**おわりに**

化学薬品や有機溶媒を使用した品質管理における化学分析をこの近赤外分光法に転換することによって、品質管理の効率化と作業環境の安全性を向上させることができます。

当グループでは近赤外分光光度計・ブランルーベ社製 InfraAlyzer 500 (図4) を設置しております。

皆様方のご利用をお待ちしております。



図4 近赤外分光光度計 (ブランルーベ社製 InfraAlyzer 500)