

近红外应用过程中的影响因素

魏 钠

(万华化学(宁波)有限公司, 浙江省 宁波市 315812)

摘要: 随着近红外技术在分析领域应用的越来越多, 给检测带来了很大方便。NIRS 具有分析速度快、无需前处理、不使用化学试剂和基本不产生固废的优点。但是在使用近红外的检测过程中, 有些因素可能影响近红外测定的准确性和适用性。本文对近红外测定过程中的影响因素进行分析。

关键词: 近红外; 模型

中图分类号: O657.33 **文献标志码:** B

0 背景介绍

随着近红外应用技术的越来越成熟, 在我们公司近红外已经应用到好多样品的检测。近红外光 (Near Infrared Spectrum, NIS) 是介于可见光 (Vis) 和中红外 (MIR) 之间的电磁辐射波, 美国材料检测协会 (ASTM) 将近红外光谱区定义为 780~2526 nm 的区域^[1]。分子在红外光谱区内的吸收产生于分子振动或转动的状态变化或者分子振动或转动状态在不同能级间的跃迁。近红外光谱主要体现分子合频与倍频的振动信息, 所以样品中每一种有机组分在近红外谱区的多个波段都有信息, 主要记录的是基频 2000cm⁻¹ 以上的基团信息, 其中以含氢基团为主, 这些基团是有机物的重要组成元素, 而近红外谱区的丰富信息决定了近红外即可测定化学成分也能分析物理性质。^[2]

目前, 我们公司近红外检测的样品和项目有 PM 中异构体、粘度、NCO、L 色; MDI 异构体; 盐酸浓度; 烧碱浓度; 甲醛浓度、甲醇、甲酸; 其他样品的 NCO; 硝酸浓度; 固含等等。但在使用中会遇到数据测量波动, 数据偏移等, 本文对近红外应用过程中的影响因素进行分析, 提高近红外应用的准确性。

1 近红外的测定原理

1.1 测试原理

近红外分析技术的原理: 选择校正样品集, 接着对校正样品集分别测得器光谱数据和理化数据, 然后将光谱数据和基础数据用适当的化学计量方法建立校正模型, 最后采集未知样品的光谱数据, 与校正模型相对应, 计算出样品的组分。^[3]图 1



图 1 模型建立过程

1.2 近红外优势

近红外光谱技术的优势：1) 使用简单和定标的无缝转移；2) 采用标准石英比色皿和一次性样品瓶；3) 能对几乎所有液体或悬浮物进行控温分析；4) 无需样品制备，无需试剂，无任何废弃物。[4]

2 影响因素分析

2.1 样品影响

样品对近红外光有很大的影响，也是关系到近红外检测模式的选择，以及是否合适近红外检测的关键因素。近红外光照射到物质后会发生吸收、透射、散射、全反射、漫反射等几种相互作用形式。如图 2 所示光和物质的相互作用方式。

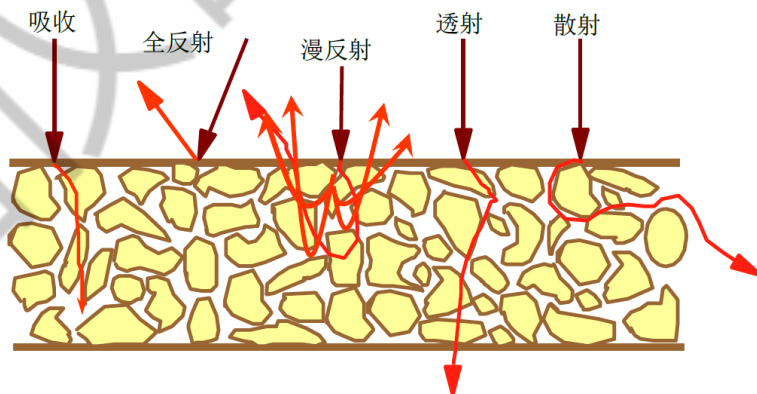


图 2 光与物质的相互作用方式

近红外光谱的采集方式主要有三种：透射式、漫反射式、漫透射式，其中以透射、漫