

「プロセスコントロールアナライザー」による 無機物・有機物・有機物間接指標・アニオンの 非破壊一斉迅速微量定量法の確立

フロンティアソリューションズ(株) 森保 友樹 (Moriyasu Yuki)
データサイエンティスト
y-moriyasu@frontiersolutions.inc
URL <https://www.frontiersolutions.inc>

はじめに

プロセスコントロールアナライザーは近赤外分析装置(以下NIRシステム)に工程管理用のアプリケーションをインストールすることで、初めて分析機器として使用可能である。プロセスコントロールアナライザーのベースとなるNIRシステムは当社では、その性能の高さゆえメトローム社の「DS2500NIRSystems」(図1)を使用している。本プロセスコントロールアナライザーは表題の通り無機物・有機物・有機物間接指標・アニオンをppb~ppmオーダーで項目数に限らずに一斉に1分弱で測定値が算出されることが特徴となっている。そのため、無機物やアニオンが $\mu\text{mw}\%$ やppb~ppmオーダーで測定可能になったことにより、製造業での品質管理に加えて製品工程管理・製品製造時に由来する製造残渣物や排液などの自社基準内での濃度管理・製品開発時におけるデータ取りの時間短縮法として最適である。以下に現状、製品開発の一端を担う化学分析室の想定される課題を以下に列挙する。

- ・ 製品開発時のデータ取得時の化学分析が必要
- ・ 製品原料の搬入時検査が必要
- ・ 製品品質保証のための検査が必要
- ・ 製品の出荷時検査が必要
- ・ 製品製造時由来の残渣物や排液の検査が必要
- ・ 分析業務に費やす人・時間・化学分析自体のコストが膨大

- ・ 分析担当者は何種類もの分析機器を担当し負荷が大きい
- ・ 分析室自体の人口密度が高くなりやすい
- ・ 1サンプルに必要な分析値が揃うのに時間がかかる
- ・ 大量のサンプルを分析することもある
上記、想定される課題の解決法としてNIR分析法が有用であった。NIRシステム導入メリットを以下に記載する
- ・ 化学分析に関わるコストを年間約75%削減可能である(実際のコストから試算した結果)。
- ・ NIR分析担当者は1名で充分である
- ・ ソーシャルディスタンス確保が可能である
- ・ 多くの分析機器がNIRシステム1台に代替可能である
- ・ 分析値が出揃うまでに3日要するものが1分弱で分析値が手に入る



図1 DS2500の外観

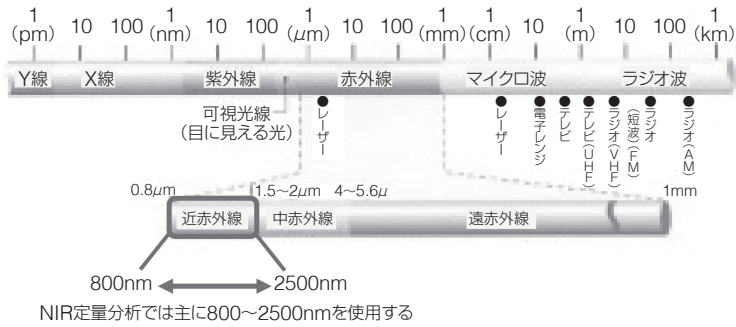


図2 NIRで用いられる波長域

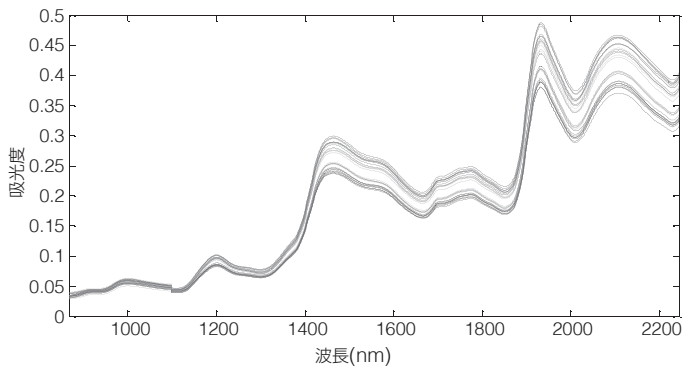


図3 NIRスペクトル

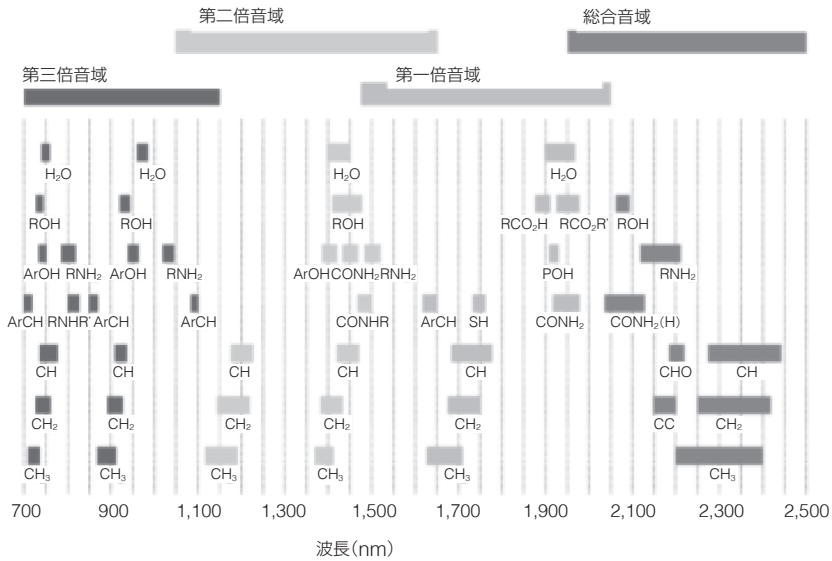


図4 NIRにおける帰属表

・ NIRシステム1台で測定するため、従来の湿式化学分析よりサンプル数が大幅に減少可能

本稿ではNIRの原理、NIRシステム、プロセスコントロールアナライザーによるルーチン分析の

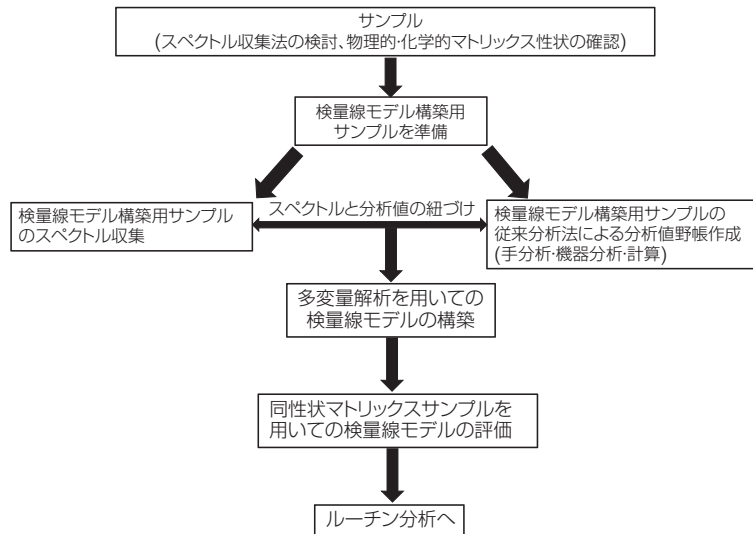


図 5 検量線モデルの構築からルーチン分析まで

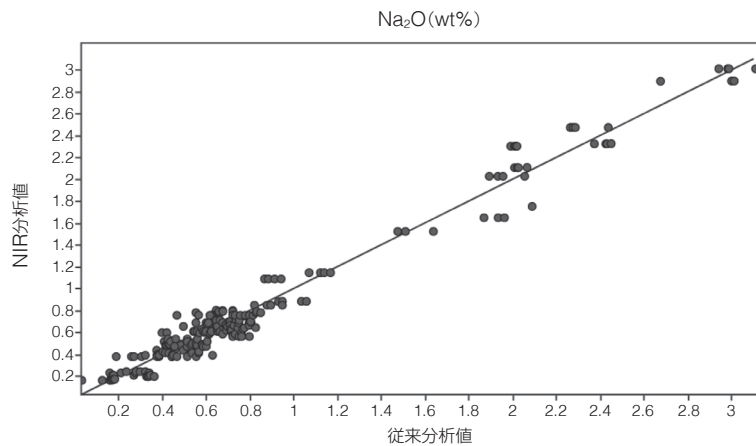


図 6 モデル式

紹介をしたい。

NIRの原理

元々、NIR定量分析は「有機物の末端可能基の分子振動によるスペクトルが帰属される」という原理から食品分野で主に使用されてきた分析法と言える^{1)~3)}。NIR領域で使用される波長域はおおよそ800~2500nm(図2)と言われている。

有機物主体のサンプルを測定した際のNIRの元スペクトル(図3)はブロードなスペクトル形状で

あるが、IRと比して感度が低いため水分子(1450、1940nm周辺)のピークが取れることが特徴とも言える。各吸収ピークは存在する官能基が波長ごとにおおよそ帰属されている(図4)。

この1サンプルについて1スペクトルを取得することで、測定対象項目数分の分析値を紐づける。スペクトルの収集からルーチン分析までの概念図を示す(図5)。収集するスペクトルはマトリックス性状も考慮して決定する。それら収集したスペクトル集団は従来法による分析値と紐づけさ