



Application Note AN-NIR-068

イソシアネートの品質管理 - 近赤外分光法によるイソシアネート含有量の迅速かつケミカルフリーな測定

Chemical-free and fast determination of isocyanate content with NIRS

イソシアネートの測定 (ASTM D7252) は、大気中の水分と反応性があり、誘導区政もあるため、分析が困難です。さらに、この種の分析に一般的に用いられる HPLC 分析はサンプル前処理の段階と化学薬品を伴い、各測定を完了するのに最長20分かかります。

この技術資料では、可視-近赤外(Vis-NIR)分析計を用いてホリウレタン製品のイソシアネート含有量について、信頼できる測定結果が得られることを示します。測定はわずか1分足らずで終わるため、可視-近赤外(Vis-NIR)分析を用いれば、製品の品質変化にすばやく対応できます。

実験および使用機器

イソシアネートサンプルを、DS RapidLiquid Analyzerを使用して、透過モードで全波長範囲(400~2500 nm)にわたって測定しました。XDS RapidLiquidアナライサの内蔵温度制御(30° C)を使用して、再現性のあるスペクトル取得を実現しました。便宜上、ハス長8 mmの使い捨てハイアルを使用したため、サンプル容器の洗浄は不要でした。データの取得、データ管理、および定量メソットの開発にはソフトウェアパッケージ Vision Air 2.0 Completeを用いました。



Figure 1. XDSRapidLiquidアナライザーと8mmディスプレイバイアルに含まれるイソシアネートサンプル。

表1. ハードウェアおよびソフトウェア機器の概要。

装置	オーダー番号
XDSRapidLiquidアナライザー	2.921.1410
使い捨てハイアル、直径8 mm、トランスミッション	6.7402.000
Vision Air2.0コンフリート	6.6072.208

結果

得られたVis-NIRスペクトル(図2)は、イソシアネート含有量の定量化のための予測モデルを作成するために使用されました。予測モデルの品質は、Vis-NIR予測と主要なメソット値との関係を示す相関図

を使用して評価されました。それぞれの性能指数(FOM)は、ルーチン分析中の予測の期待される精度を示しています。

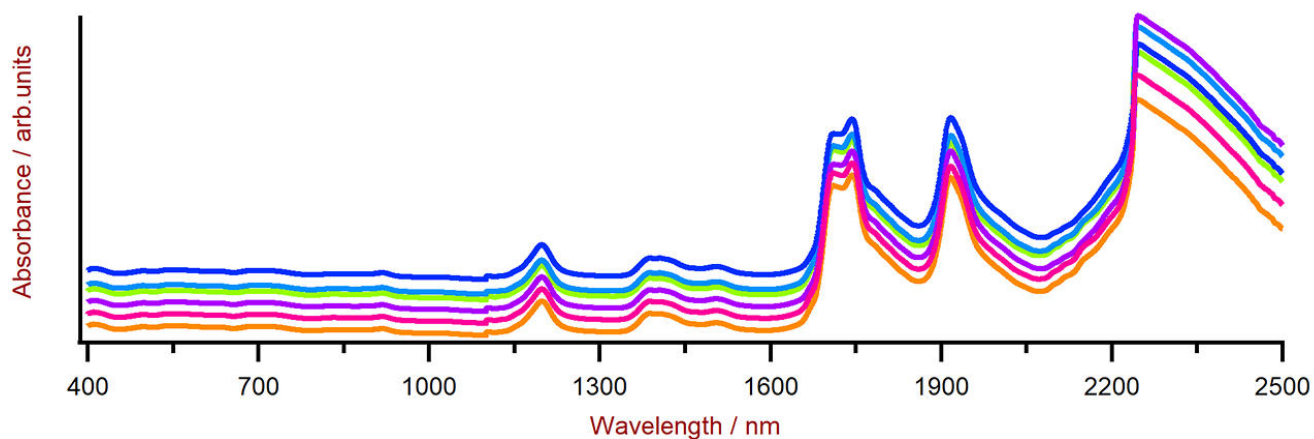


Figure 2. XDSRapidLiquidアナライザーと8mmディスポーザブルバイアルを使用して得られたイソシアネートVis-NIRスペクトルの選択。表示上の理由から、スペクトルオフセットが適用されました。

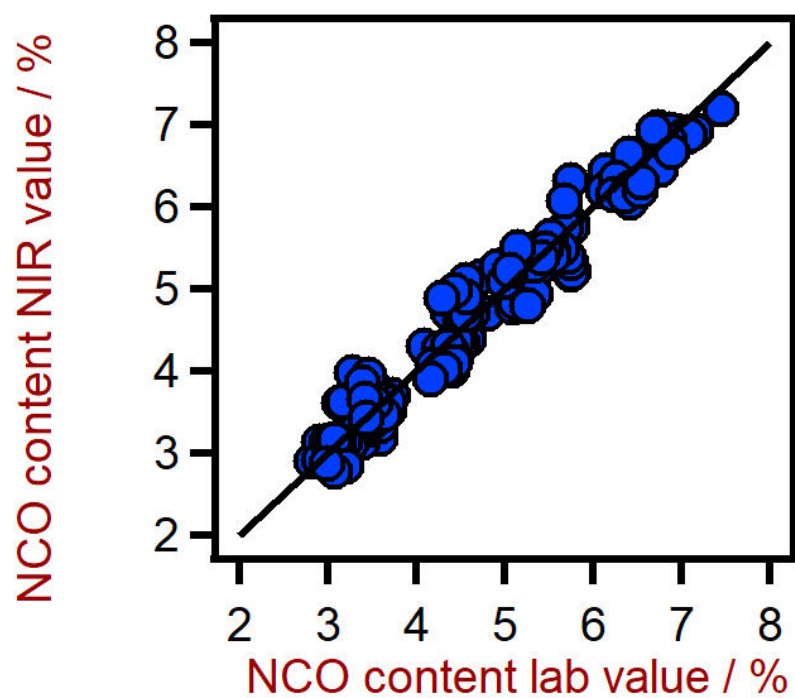


Figure 3. XDS RapidLiquidアナライザーを使用してイソシアネート（NCO）含有量を予測するための相関図。イソシアネート含有量ラボ値は、滴定を使用して評価しました。

表2。イソシアネート(NCO)の予測のメリットの図 XDSRapidLiquidアナライザーを使用したコンテンツ。

性能指数	値
R^2	0.968
校正の標準誤差	0.24
交差検定の標準誤差	0.26

CONCLUSION

NIR(3)1NIR

3

HPLC	20()+ 20(HPLC)
------	----------------

CONTACT

143-0006 6-1-1
null 9

metrohm.jp@metrohm.jp



NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

あらゆる種類の液体および懸濁液の迅速で正確な分析。

NIRS XDS RapidLiquid Analyzerは、液体製剤および物質の迅速で正確な分析を可能にします。ボタンを押すだけで正確な測定結果が得られるため、NIRS XDS RapidLiquid Analyzerはラボおよびプロセスにおける品質管理のための信頼性が高くシンプルなソリューションです。サンプルは、再使用可能な石英製キュベットまたは使い捨てガラス製バイアルに置かれます。温度調整されたサンプルコンパートメントは、再現性のある分析条件、およびそれによる正確な測定結果を保証します。



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - 汎用性に優れた分光法ソフトウェア。

Vision Air Complete は、規制環境下での使用のための、操作の容易な最新のソフトウェアソリューションです。

Vision Air の利点の概要:

- 調整済みのユーザーインターフェースを伴う個別のソフトウェアアプリケーションにより、直観的かつ容易な操作が保証されます。
- 作業手順の容易な作成およびメンテナンス
- 安全かつ容易なデータ管理のための SQL データベース

バージョン Vision Air Complete (66072208) には、可視近赤外分光法を用いた品質管理のための全てのアプリケーションが含まれています:

- 装置管理およびデータ管理のためのアプリケーション
- メソッド開発のためのアプリケーション
- ルーチン分析のためのアプリケーション

その他の Vision Air Complete ソリューション:

- 66072207 (Vision Air Network Complete)
- 66072209 (Vision Air Pharma Complete)
- 66072210 (Vision Air Pharma Network Complete)