

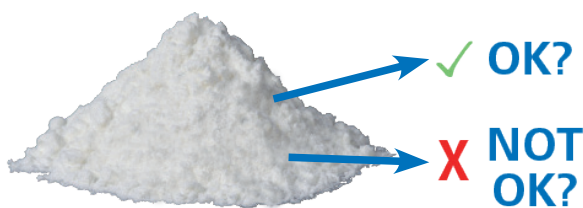
## Application Note

# 原材料の品質管理をスマートに ALPHA と OPUS/QuickCompare の活用

### はじめに

あらゆる製品の製造現場において、品質管理は最重要課題のひとつと言えます。その目的は、製造工程でのトラブルを未然に防ぎ、最終製品に対して常に一定レベルの品質を保証することにあります。製造過程の最上流にあたる原材料の受け入れにおいては、入荷品が正しいものであるか、求められる品質を満たしているか、不純物が混入していないか等を、正しく判別する必要があります。一方で、生産規模が大きくなるに従い検査対象物は増えるため、検査時間の短縮と作業の簡略化・効率化が常に求められています。

こうしたニーズに対して、赤外分光法は、スピード、操作性、信頼性、どれを取っても最良の分析手法のひとつと言えます。ここでは、ブルカー・オプティクスコンパクト FT-IR “ALPHA” と、付属の “OPUS/Mentor” ソフトウェアに含まれる “QuickCompare” 機能を用いた、原材料の判別分析について紹介します。



### 赤外スペクトルと品質管理

フーリエ変換型赤外分光計 (FT-IR) の登場以来、赤外分光分析法は様々な分野において広く活用されるようになってきました。FT-IR によって得られる赤外スペクトルを解析することで、C=O、C-H、N-H など、物質を構成する分子中の官能基に関する情報を得ることができます。多くの物質は、人間の指紋のように、それぞれ固有な赤外スペクトルを与えるため、これらをもとに物資の同定や識別が可能となります。さらに、得られるスペクトルの強度は、物質を構成する成分の濃度に比例するため、その情報をもとに定量分析を行うこともできます。

品質管理においても、この特性を活用することで、迅速かつ正確な分析が可能となります。例えば、原材料の “正常品” の赤外スペクトルと、検査対象品の赤外スペクトルを比較することで、両者が同一であるか否かを判別することが可能であり、ここで紹介する判別分析もこの考えに基づきます。

### ALPHA による品質管理

ALPHA は、設置面積わずか A4 用紙 1 枚分のコンパクトなボディに、ブルカーならではの高い分光性能と多彩な機能を搭載した FT-IR です (図 1)。コンパクトかつ堅牢な ALPHA は、使用する場所を選びませんので、原料の受入検査をはじめとする品質管理用途に最適な 1 台です。また、バッテリーオプションや高湿度環境用オプションなどを組み合わせることで、さらに活躍の場が広がります。

ALPHA には、様々な形状の試料に対応できるよう、数多くのサンプリングモジュールが用意されています。その中でも、堅牢かつ化学的安定性に優れたダイヤモンドを



図1. ALPHA-P ダイヤモンドATR付き FT-IR 分光計

ATR プリズムとして採用する Platinum-ATR モジュールは、操作性と汎用性に優れたサンプリングモジュールです。気体を除くあらゆるタイプの試料に適用が可能であり、特別な前処理を加えることなく、試料をそのまま ATR プリズムに密着させるだけで、ただちに測定を開始することができるため、迅速かつ簡便な作業性が求められる受入検査の現場には、最適なサンプリング手法と言えます。

さらに、ALPHA に付属するソフトウェアパッケージ OPUS に標準で含まれる QuickCompare 機能を用いることで、判別分析を効率良く進めることが可能となります。

### QuickCompare 機能を用いた判別分析

QuickCompare は、標準品 (= 正常品) と検査対象品のふたつの赤外スペクトル間の相関係数をもとに、合格判定を行います。ふたつの関数  $y_1(k)$  と  $y_2(k)$  の相関係数  $r$  は、両者の標準偏差  $\sigma_{y_1}$  と  $\sigma_{y_2}$  の積と共分散の比として求められます：

$$r = \frac{\text{Cov}(y_1(k), y_2(k))}{\sigma_{y_1} \cdot \sigma_{y_2}}$$

$r$  の値は -1 から +1 の範囲をとり、ふたつのスペクトルの相似性の程度を示し、+1 の場合はふたつのスペクトルは完全に同一とみなされます。最終的に  $r$  の値はパー

セント表示に置き換えられ、 $-1 \leq r < 0$  の範囲では 0%、 $0 < r \leq +1$  では 0 ~ 100% の間で線形変換されます。この数値が、あらかじめ管理者が設定した“しきい値”よりも大きな場合には、検査品と標準品は同等、すなわち検査品は、合格品 (OK) と判定されます。

なお、QuickCompare には、次の 3 つの比較方法が用意されており、検査の目的に応じて選択することが可能です。

- スペクトル 1 本 (= 標準品 1 点) との比較：
  - ⇒ より厳密な管理に有用
- 複数のスペクトルの平均との比較：
  - ⇒ バッチ間の変動を考慮する場合に有用 (図 3)
- 複数のスペクトル (= 複数の標準品) との比較：
  - ⇒ 数多くの材料を同時に管理する場合に有用 (図 4)

実際の使用に際しては、比較対象となる標準品のスペクトルを測定して登録するだけで、その他の煩雑な作業は不要です。

また、QuickCompare による判別分析の結果は、スペクトルデータに含まれる履歴の一部として保存されるため、スペクトルと共に後からいつでも確認することができます。

さらに QuickCompare による判別分析は、品質管理用途に開発された OPUS のアドオン機能“QC ウィザード

(QualityControlWizard)”を組み合わせることで、一連の作業をよりスムーズに進めることが可能となります。分析作業の各ステップで必要となる操作を QC ウィザードがグラフィカルに表示しますので、オペレータはこの流れに沿ってマウスを操作するだけで、材料の検査を簡単・確実に行うことができます。判別に必要な時間も 1 検体あたり 1 分程度と、非常に効率的です。

検査対象品に関する判別分析の結果が不合格“NOTOK”であった場合には、図 2 に示すように、検査品がどのような物質であるか、ライブラリサーチを活用して解析することも可能です。

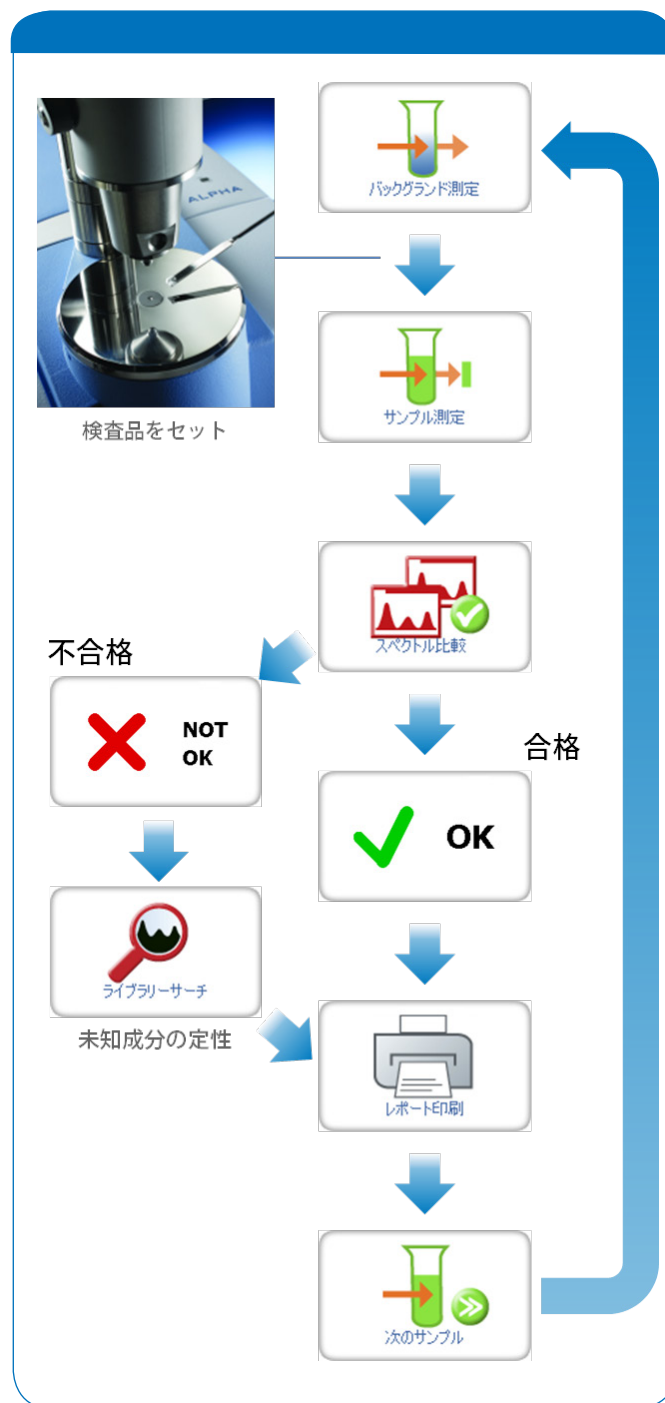


図2. OPUSのQCウィザードによる判別分析フローの一例

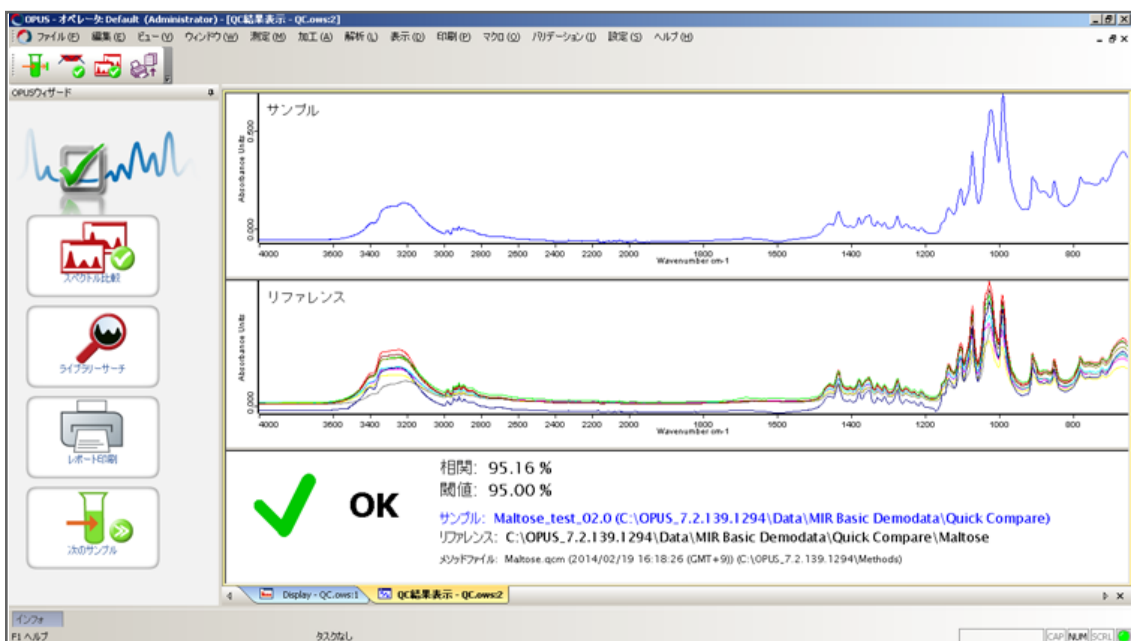


図3. QuickCompareによる判別結果の画面。ここでは、検査対象物 マルトース水和物 について、複数の標準品の平均データと比較して合否を判定。

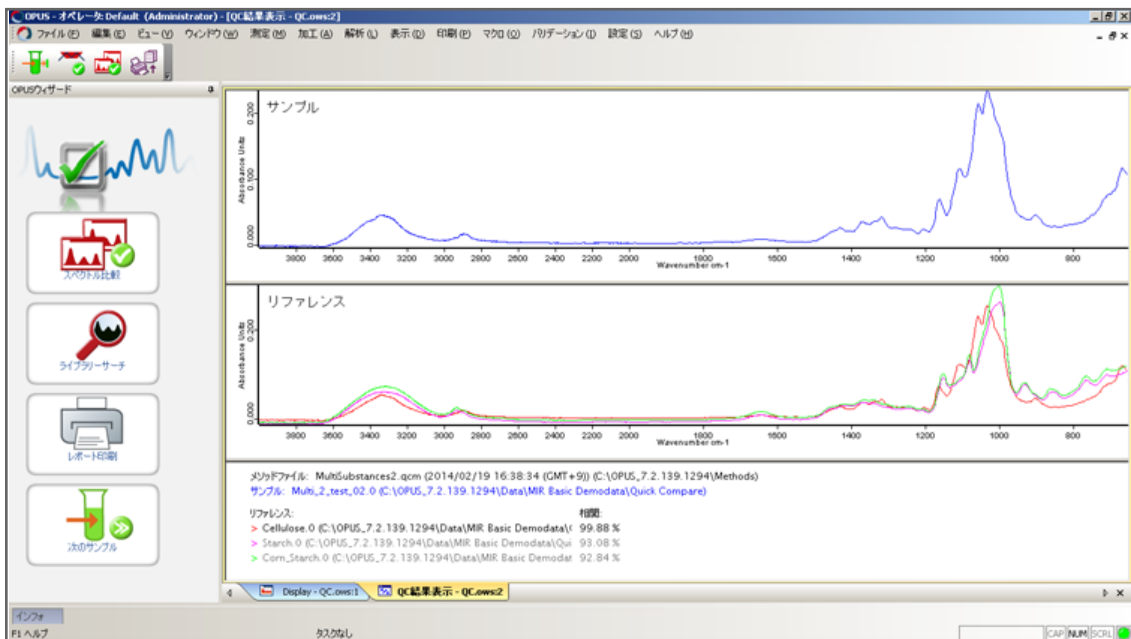


図4. 複数のスペクトル(=複数の標準品)との比較による判別の例。このケースでは、検査対象品は“セルロース”と判定され、しきい値以下の候補はグレイアウト表示されます。

## まとめ

以上のように、赤外分光法のもつ高い同定能力を活かした判別分析は、原材料の受入検査等の品質管理に最適な手法のひとつです。とくに、ダイヤモンド ATR を装備する超小型 FT-IR ALPHA と QuickCompare、QC ウィザー

ドの組み合わせでは、分析に関する特別な知識を必要とせず、シンプルな操作で精度の高い判別が可能です。また、試料の前処理や検査試薬を必要としないため、効率的かつ経済的な品質管理と生産性の向上が期待できます。



[www.bruker.jp/optics](http://www.bruker.jp/optics)

## ● ブルカー・オプティクス株式会社

本社：〒104-0033 東京都中央区新川 1-4-1 住友不動産六甲ビル  
Phone: 03-3523-6870 Fax: 03-3523-6871

大阪営業所：〒532-0004 大阪市淀川区西宮原 1-8-29 テラサキ第2ビル  
Phone: 06-6394-8118 Fax: 06-6394-9003