

多変量解析による天然材料分析と依頼試験への応用

○宇井 剛*1)

1. はじめに

「人に環境に優しい」をキーワードとした商品づくりが積極的になってきている。特に天然材料は、触感・風合い等、人に優しい高機能性が求められるとともに、再生可能なカーボンニュートラルな材料として期待されている。しかし、天然材料は似たような材料が多く、品質を保証するために必要な素材を鑑別するには、長年の経験と熟練が必要で、この習熟者が不足するとともに鑑別に時間とコストがかかる。そこで多変量解析の主成分分析(PCA)とフーリエ変換赤外分光光度計(FT-IR)を利用した天然材料の鑑別と、依頼試験への応用について検討した。

2. 実験方法

2.1 実験試料

天然材料として、未精練の亜麻と苧麻ソーピングして用いた。

2.2 主成分分析条件の決定

標準試料をKBr錠剤法で10回測定し、前処理として1次微分(差分法)を行い、主成分数を3として、 $800\text{cm}^{-1}\sim 1800\text{cm}^{-1}$ の波長範囲の主成分分析(PCA)を行った。その結果 $850\text{cm}^{-1}\sim 1150\text{cm}^{-1}$ の付近の範囲が、第一主成分、第二主成分、第三主成分共にスコアが高いことがわかった。このとき第三主成分に亜麻と苧麻の差が現れることがわかった。波長別主成分スコアを図1、第一主成分-第三主成分スコアを図2に記す。

2.3 精練による影響

精練条件を変えて影響を調べた。結果、精練を行うと解析結果が異なることがわかった。しかし、解析条件を変えることにより主成分分析を行うことができた。水酸化ナトリウム(4%owf)、時間(30分)、温度(90°C 以上)で精練した試料を、解析条件を変えて($970\text{cm}^{-1}\sim 990\text{cm}^{-1}$)解析した結果の第一主成分-第三主成分スコアを図3に記す。

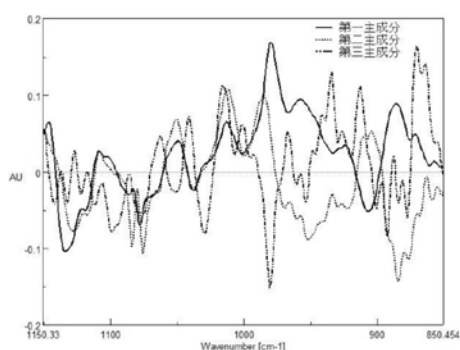


図1. $850\text{cm}^{-1}\sim 1150\text{cm}^{-1}$
波長別主成分スコア

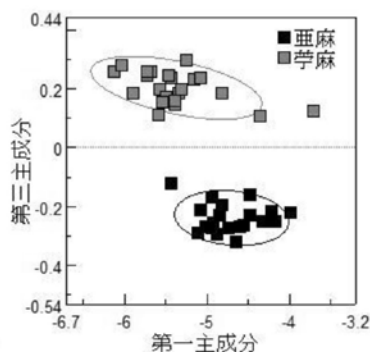


図2. 第一主成分
-第三主成分スコア

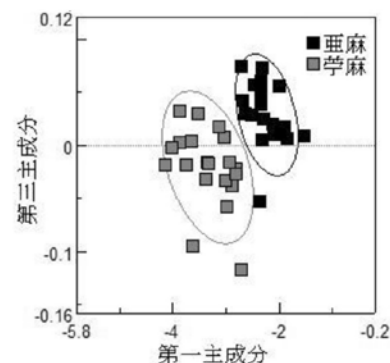


図3. 精練後第一主成分
-第三主成分スコア

3. まとめ

主成分分析(PCA)とフーリエ変換赤外分光光度計(FT-IR)を依頼試験に利用する場合、以下のような方法が考えられる。

- ・工場、事業所が受け入れている原材料を母集団とした、その工場、事業所のオーダーメイドデータベースの構築。
- ・オーダーメイドデータベースを元に、受け入れ検査スクリーニング。

以上二つの依頼試験が考えられる。

*1) 城東支所