

近紅外光譜儀之開發及應用

Development and Application of Near Infrared Spectrometer

陳志文、林群富、黃泰綸

Chih-Wen Chen, Chun-Fu Lin, Tai-Lun Huang

採用 InGaAs 線型感測器的二極體陣列系統 (diode array system) 和平場化凹面光柵，儀科中心開發完成一款偵測波長範圍為 900 nm—1700 nm 的近紅外光譜儀。此近紅外光譜儀具有結構簡易、無移動元件及快速掃描等優點。文中並對近紅外光譜儀的系統結構、光柵光路、電子電路、無段式積分時間、測試及應用等逐一作介紹，希望能提供給國內相關產業之從業人員作為參考。

Near infrared (NIR) spectrometer with wavelength range from 900 nm to 1700 nm has been carried out by adopting diode array system, flat-field concave grating and InGaAs linear sensor. This type of NIR spectrometer has many advantages such as simple structure, no moving parts and rapid scanning. The article also introduces the system structure, optical path of grating, circuit architecture, stepless integrating time, tests and applications about NIR spectrometer. We look forward to providing information for researchers and workers in related industries for reference.

一、前言

近紅外光的光譜區域一般是指電磁波波長範圍介於 800 nm 到 2500 nm，位於可見光與中紅外光之間。近紅外光譜儀如同其他分析化學儀器，應用範圍涵蓋多種農業與工業領域⁽¹⁻⁴⁾，表 1 列出幾種代表性的領域，而最早且最成功之應用是在分析農牧產品中的水分、糖分、蛋白質、纖維素、脂肪及澱粉等。近紅外光譜分析可以在不破壞樣品之情況下，藉由分析樣品之吸收光譜即可預測其成分濃度。譬如作水果之甜度分析時，只要以光纖收集水果表皮之反射近紅外光作分析，就可以預測水果之

糖度，不同糖度之水果再依據糖度等級接續進行品級分類，就可以完成高級水果之自動化甜度分類，提高產品之售價。若和其他分析化學的方法作比較，近紅外光譜分析具有以下多種特性：

1. 分析樣品的時間很短，約在數毫秒 (ms) 至數秒間。
2. 波長範圍內一次全光譜掃描，即可同時分析多種化學成分。
3. 非破壞性檢測，樣品可以重複使用。
4. 測試樣品可以是固體、半固體、液體、粉狀等等。
5. 不耗費化學試劑，安全性高，污染性少。
6. 可以在線上 (on line) 檢測，也可以用光纖進行遠

距離遙測。

在今日工業蓬勃發展之後衍生出許多污染及廢棄物，是當今有識之士及各國領袖最為關切的。如何減少污染與廢棄物以及將廢棄物回收再利用，已成為當今環保最重要議題之一。近紅外光譜儀可以在環保應用上作出貢獻，譬如以近紅外光譜儀為主的線上自動化廢棄塑膠分類系統，可以作快速有效的分類。

國家實驗研究院儀器科技研究中心 (以下簡稱儀科中心) 整合光機電技術，開發出一款波長範圍介於 900 nm 到 1700 nm 的近紅外光譜儀，圖 1 是此儀器之外觀，詳細規格如表 2 所示。



圖 1. 儀科中心開發之近紅外光譜儀。

二、原理

近紅外分析樣品之原理是透過光源照射到樣品，經過反射、穿透及漫射等方式，透過鏡頭及光纖收集，由感測器 (detector) 偵測到光輻射量，經類比／數位轉換器 (A/D converter) 訊號處理後，得到樣品之近紅外光譜，再經由數值計算後得到樣品之吸收光譜，最後進行化學計量學分析以建立校正模型，以此校正模型來預測樣品之種類及化合物的組成與含量。

近紅外光譜主要是由於樣品吸收近紅外光時，分子間產生振動，使分子狀態由基態向高能階躍升所產生的吸收光譜訊息，主要用以分析具有 O-H、N-H、C-H 等官能基的結構為主，隨著各樣品的官能基種類與濃度的不同而呈現出不同的近紅外吸收光譜，藉此推測待分析樣品所含化合物之種類與含量。

表 2. 自製近紅外光譜儀規格。

項目	規格
波長範圍	900 nm—1700 nm
轉換解析度	12 bit
光譜解析度	6 nm (FWHM)
狹縫寬度	50 μ m
感測器像素	256 像素
像素大小	50 μ m \times 500 μ m
尺寸	182 mm \times 127 mm \times 57 mm
通信介面	USB port

表 1. 近紅外光譜儀的代表性應用領域。

應用產業	待測物	分析項目
農漁牧業	穀物	脂肪、蛋白質、水分、纖維質、產地與產季鑑別
	水果	甜度、酸度、品質分級
	菸草	尼古丁、產地鑑別、等級分類
食品	酒類	乙醇、產地、真偽、pH 值
	肉類	脂肪、蛋白質、水分
	飲料	糖分、咖啡因、酸度
石化業	煉油業	辛烷值、苯、乙醇
	天然氣	烷類組成、總熱含量
高分子	原料	純度、水分
	加工過程	聚合度、添加劑含量
	產品	密度、分子量、粒度分布
化學工業	化學品	純度、水分、合成反應、有機無機鹽鑑別
環保	廢舊塑膠	塑膠分類
	土壤	污染鑑定、廢水 pH
	化學廢棄物	廢棄物含量、生物處理反應監控
生物醫學	血液	血糖、尿素、脂肪酸、膽固醇、蛋白質
	微生物或病毒	菌種鑑定
其他	刑事鑑定	毒品分析、鑑定偽鈔
	煤炭	灰分、熱含量、品質分級
	紙漿	皂化值、紙品添加劑
	紡織	水分、聚酯比例、染料、添加劑
	油漆及墨水	原料分析、溶劑純度、色素品質

基本上，近紅外光譜儀的量測系統包括光源、分光系統、感測器、訊號處理電子電路及取樣分析軟體等。一般近紅外光譜儀的光源多採用鎢絲—鹵素燈，其波長涵蓋範圍從 350 nm 到 3000 nm，足以覆蓋整個近紅外光譜所定義之波長範圍。感測器分為矽感測器 (適於 400 nm—1100 nm)、硫化鉛感測器 (適於 900 nm—2500 nm)，以及 InGaAs 感測器 (750 nm—2500 nm) 等，其中硫化鉛感測器之非線性感應是其弱點，而 InGaAs 感測器具有線性感應特性，但價格昂貴是其缺點。近紅外光譜儀的分光系統主要是將連續混合波長個別分離出來，藉以判讀待分析樣品之特徵光譜，進行定性與定量分析。

三、近紅外光譜儀系統設計

1. 系統結構

近紅外光譜儀的結構依其分光原理大致可以區分為以下幾種：(1) 濾光片型，(2) 掃描式光柵單光儀，(3) 快速傅氏轉換干涉儀，(4) 聲光調變濾光器 (acoustic-optical tunable filter, AOTF)，(5) 二極體陣列等。不同結構之分光原理見於一般儀器分析書籍⁽⁵⁻⁷⁾，在此不加以贅述。

濾光片型的優點是結構簡單，主要作為專用型分析儀器，譬如測量農產品成分時，可以選擇適當波長濾光片，較適合生產線上使用，缺點是能夠裝置的濾光片數量有限，無法分析複雜之樣品，僅能分析特定的化學成分。

掃描式光柵單光儀由可移動式光柵所組成，優點是可以做全光譜掃描，有高的訊噪比和分辨率，缺點是有移動物件，在光譜來回掃描時可能存有磨損問題，進而影響光譜之可靠性。此類儀器適合研究實驗室與品管使用，不適合裝置在有高溫與震動的生產工廠內。

快速傅氏轉換干涉儀是利用相位差產生時間區域的干涉訊號，經過快速傅立葉轉換成頻率區域的光譜訊號，傳統的傅氏轉換干涉儀的光學設計是以麥克森干涉儀為參考，優點是有高的解析度與掃描速度，缺點是因為有移動物件，所以較適合防震環境，同樣地比較適合實驗與品管用，不適合線上檢

測使用。

聲光調變濾光器是利用光線照射在晶體上產生繞射的原理而設計，此晶體附著在壓電片上，其作用類似於移動光柵，藉由改變通過壓電片上之輻射頻率，即可改變近紅外的波長，進行全光譜掃描。整個系統無移動件，掃描速度極快是其優點，較適合線上檢測使用，但儀器的分辨率相對較低，售價也較高。

二極體陣列光譜儀採用光柵分光與固定光路設計，其感測器是一種陣列分布緊密的感光二極體，此結構方式不同於掃描式光柵單光儀，其特色在於不具有移動物件，可以避免因移動物件之磨損所造成之光學精確度偏差。另外，具有快速掃描 (1 ms—500 ms) 及波長範圍內全光譜同時測量等優點。二極體陣列感測器屬於線型陣列，其像素 (pixel) 數目從 128、256、512 至 1024 不等，目前單一像素之面積尺寸有 $25\ \mu\text{m} \times 250\ \mu\text{m}$ 、 $25\ \mu\text{m} \times 500\ \mu\text{m}$ 、 $50\ \mu\text{m} \times 250\ \mu\text{m}$ 、 $50\ \mu\text{m} \times 500\ \mu\text{m}$ 等。在波長範圍的選擇上，二極體陣列感測器屬於短波近紅外範圍，一般以矽材料 (400 nm—1100 nm) 為主，而近紅外範圍一般以 InGaAs (750 nm—2500 nm) 或銻 (800 nm—1800 nm) 材料居多。本研究採用 InGaAs 二極體陣列感測器，光譜儀的波長偵測範圍設定在 900 nm—1700 nm。

2. 光柵光路

以光柵作為分光元件的光譜儀，其光學設計架構大致可以區分為四種：Czerny Turner (圖 2)、

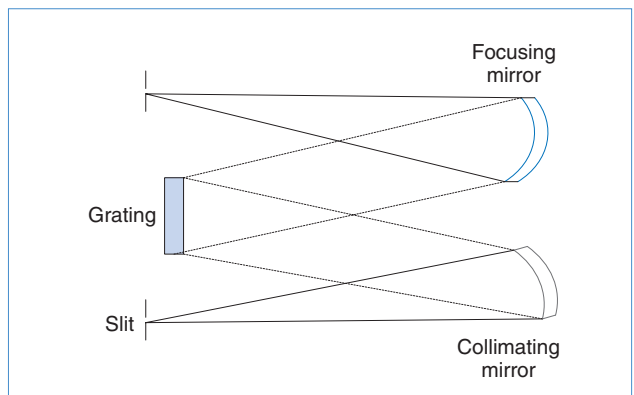


圖 2. Czerny Turner 系統。

Crossed Czerny Turner (圖 3)、Rowland Concave grating (圖 4) 及平場化凹面光柵 (flat-field concave grating) (圖 5) 等。Czerny Turner 與 Crossed Czerny Turner 光路設計包含狹縫 (slit)、光柵 (grating)、準直鏡 (collimating mirror)、聚焦鏡 (focusing mirror) 等，整個光路所需之元件數相對比較多。Rowland Concave grating 包含狹縫、凹面光柵，優點是所需光學元件較少，光能量的損失相對較少，缺點是成像面為曲面。平場化凹面光柵可將成像面由曲面改進為平面，如此可以使用線型的陣列二極體感測器作為偵測光量之用，方便系統設計與整合。

3. 狹縫與無狹縫的設計比較

在光譜解析度的設計上，可以採用狹縫 (slit) 設計或無狹縫 (slitless) 設計。一般光譜儀大部分都

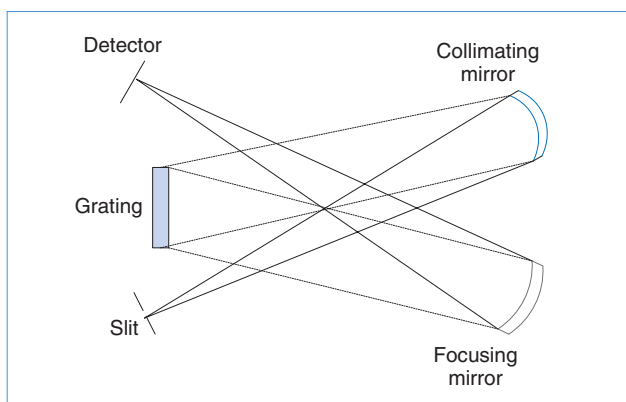


圖 3. Crossed Czerny Turner 系統。

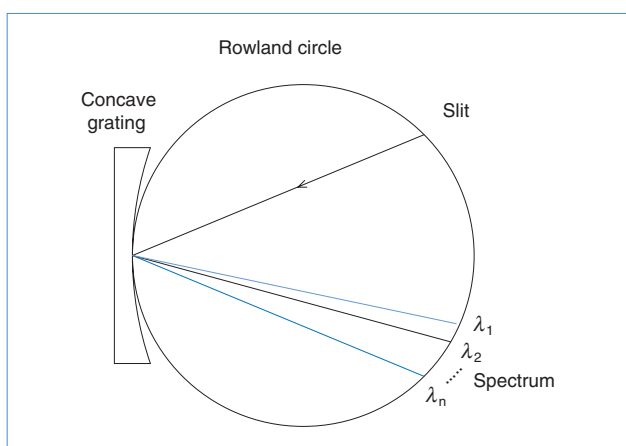


圖 4. Rowland Concave grating 系統。

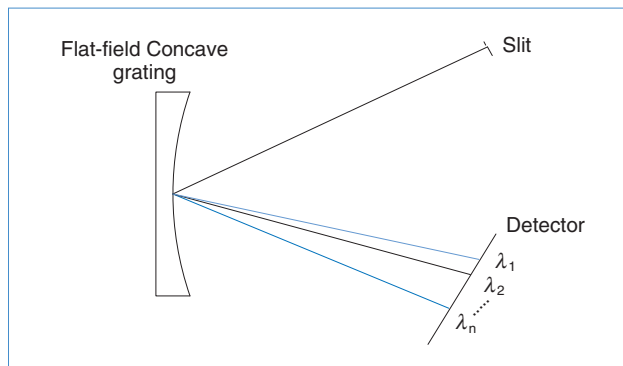


圖 5. 平場化凹面光柵系統。

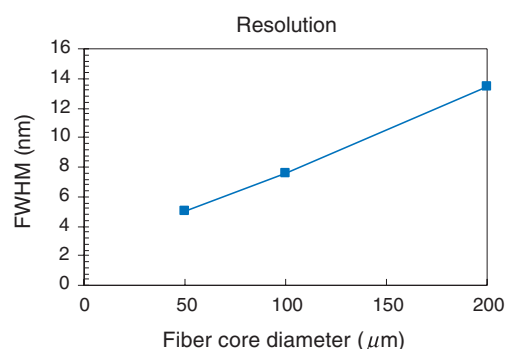


圖 6. 三種光纖芯直徑之光譜解析度。

使用了入口狹縫，以控制分光後之光譜解析度。由於光纖的發展迅速，將光纖作為傳導光源進入光譜儀的使用也漸為主流，再加上光纖芯 (fiber core) 可以製作得很細，如 50 μm ，所以也有人將光纖芯直接取代入口狹縫，如此一來，可以節省元件之數量。在作實驗時，先以光纖取代狹縫，亦即直接以光纖芯當作入口狹縫，選取之光纖芯直徑 (fiber core diameter) 有 50 μm 、100 μm 、200 μm 三種，分別取樣後，分析各別光纖芯所得到之半高寬 (full width half maximum, FWHM)，結果如圖 6 所示。近紅外光譜分析除了解析度之外，收光量也很重要，光纖芯直徑 (fiber core diameter) 越小固然解析度越高，但相對的，光纖芯直徑越小進光量越小，雜訊增加。同時針對三種光纖芯直徑 50 μm 、100 μm 、200 μm 在相同的光源條件下進行測試，選取氬 (argon) 光源之 912 nm、965 nm、1047 nm 等三個特徵波長進行比較，將結果表示於圖 7。由結果可以看出，進光量的大小有非常大的差異。建議如

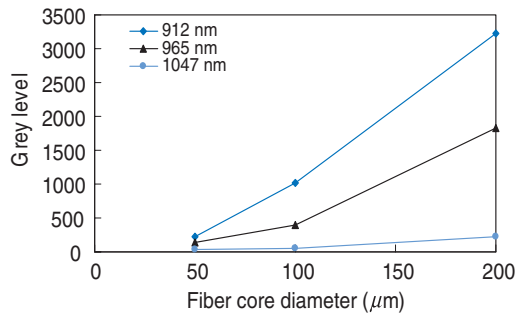


圖 7. 三個波長下，三種光纖芯直徑之光譜強度比較。

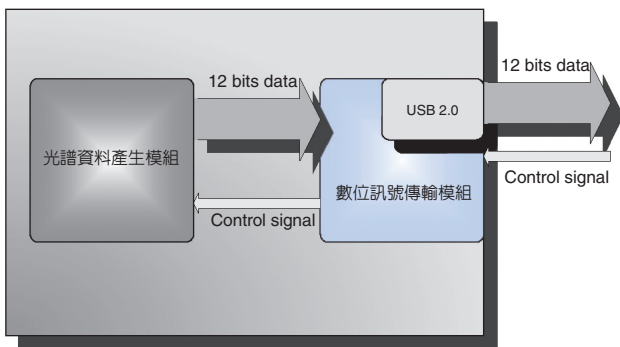


圖 8. 線型近紅外電子電路模組系統圖。

果解析度要求不高時，可以採用無狹縫設計。但若要高解析度又要伴有高進光量，除非感測器對低光量的響應很靈敏且訊噪比高，否則建議採用傳統方式配有標準狹縫。本研究據此採用入口狹縫設計。

4. 電子電路模組硬體架構

電子電路模組以 InGaAs 線型近紅外感測器作為感光元件，此感測器共有 256 個像素，每一個像素的尺寸為 $50 \times 500 \mu\text{m}$ ，類比／數位轉換位元數為 12 位元 (bits)，像素傳輸頻率為 50 kHz，訊號傳輸介面使用 USB 2.0。

線型近紅外電子電路模組之系統實現概念如圖 8 所示，光譜資料產生模組在接收近紅外光之後，會將之轉換成類比的電位訊號，再將類比的電位訊號取樣量化為 12 位元的數位資料後傳給下一級。而數位訊號傳輸模組接收後，再將資料轉成符合 USB 2.0 標準格式，經由 USB 2.0 傳輸介面傳輸至 PC 端。PC 端亦經由此 USB 2.0 傳輸介面傳送控制訊號來控制本模組。數位訊號傳輸模組也內含整個線型近紅外電子電路模組之電源供應模組。

(1) 光譜資料產生模組

圖 9 所示為光譜資料產生模組之方塊圖，使用時脈產生電路 (timing generator) 產生各種驅動時脈訊號驅動 InGaAs 線型近紅外感測器，使感測器輸出正確之光電轉換訊號。此光電轉換訊號經前端電路放大，再傳送至類比／數位轉換器 (A/D converter)。類比／數位轉換器將類比資料量化成為 12 位元之數位資料後，便可將資料輸出至數位訊號傳輸模組。

光譜資料產生模組中最大的設計重點為時脈產生電路，此部分電路對驅動時脈的準確度要求較高，準確度將會嚴重影響感測器是否能正確輸出光電轉換訊號。另一設計重點為 FPA (focal plane array) 中負責放大訊號的前端電路 (pre-amplifier and line clamp)，由於電路模組工作於高頻時脈下，故前端電路對抗雜訊能力要求較高，過高的雜訊將會嚴重干擾近紅外感測器輸出之光電訊號，造成訊號無法辨識。

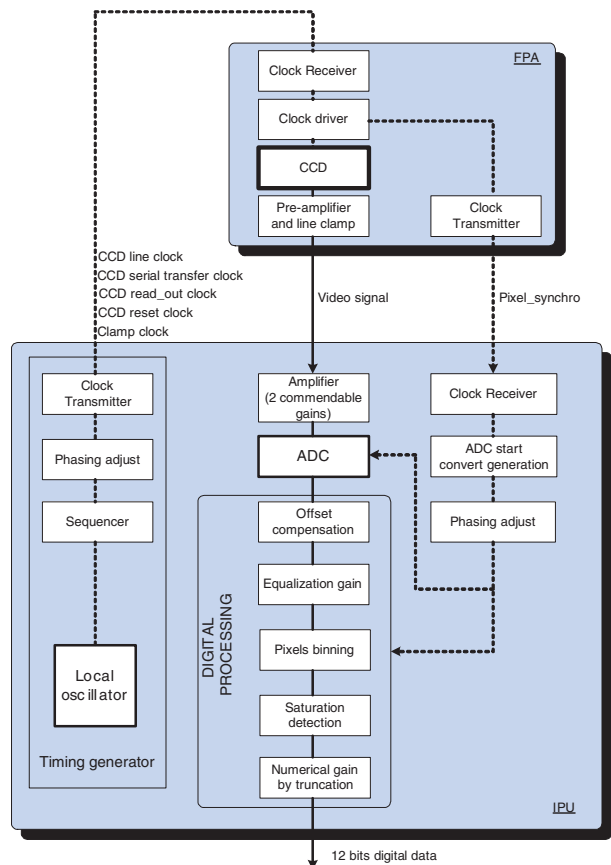


圖 9. 光譜資料產生模組方塊圖。

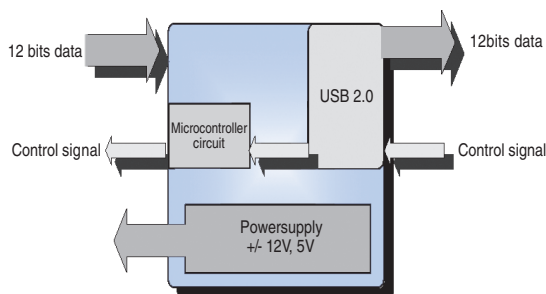


圖 10. 數位訊號傳輸模組之方塊圖。

(2) 數位訊號傳輸模組

圖 10 為數位訊號傳輸模組之方塊圖。數位訊號傳輸模組之功能主要作為 12 位元光譜資料傳輸介面、PC 端下達之控制訊號傳輸介面，以及整個線型近紅外電子電路模組之電源供應。

(3) USB 2.0 傳輸設定

數位訊號傳輸模組中的 USB 2.0 控制部分，使用等時傳輸與巨量傳輸來達到資料通訊與命令控制的目的。利用等時模式將光譜訊號由模組傳送至 PC 端，另外利用巨量模式傳送 PC 端設定之控制命令訊號至光譜資料產生模組。使用此兩種模式操作，原因為使用等時模式傳輸可即時傳輸光譜訊號，增加光譜資料抓取的速度，而巨量模式具有資料檢驗的功能，故可保證設定命令可以完整的傳達。

5. 無段式積分時間

由於光譜儀在使用上必須以全波段掃描，所以常會出現部分波段的訊號過飽和或訊號過低的情

況。如果僅設計固定段數之積分時間供選擇，恐怕不敷使用，所以具有無段式積分時間的選擇，對使用者而言是非常方便的。這裡所稱之無段式積分時間，實際上是指在特定時間範圍內，積分時間的間隔 Δt 儘可能的小，使用上像是無段式的變化。在經過測試分析後，決定積分時間範圍設定為 1 ms—6700 ms，並且以 1 ms 作為間隔 Δt ，共有 6700 段。選擇 1 ms—6700 ms 的原因是在 1 ms 以下，即便是很強的光源，訊號也很弱，沒有特別意義，在 6700 ms 以上，曝光時間過久，訊噪比很差，訊號非常不理想，所以在 1 ms—6700 ms 應該足夠滿足近紅外光譜分析所需，尤其是時間間隔為 1 ms，幾乎可以視為無段式之設定。同時由於所能提供給積分時間設定的腳位不多，所以改採用串進並出的 I/O 方式以滿足需求。

無段式積分時間設定屬於電路中數位電路端之時脈電路，下面將說明時脈電路之硬體系統架構與時脈電路架構設計。

(1) 時脈電路之硬體系統架構

時脈電路之硬體系統架構如圖 11 所示，使用者可在圖控界面上輸入積分時間，經由電腦運算轉換成二進位碼後，再經由 USB chip 傳送給 CPLD 模組，然後產生近紅外感測器所需之時脈驅動訊號，以達驅動之目的。時脈電路中使用 Altera 所生產型號為 EPM7160STC 之 CPLD (complex programmable logic device，複雜可程式邏輯元件) 的晶片，以產生 InGaAs 近紅外線感測器所需之時脈驅動訊號。該 CPLD 具有 100 隻腳位，內部之 logic element 為 160 個。使用 CPLD 時，可透過撰

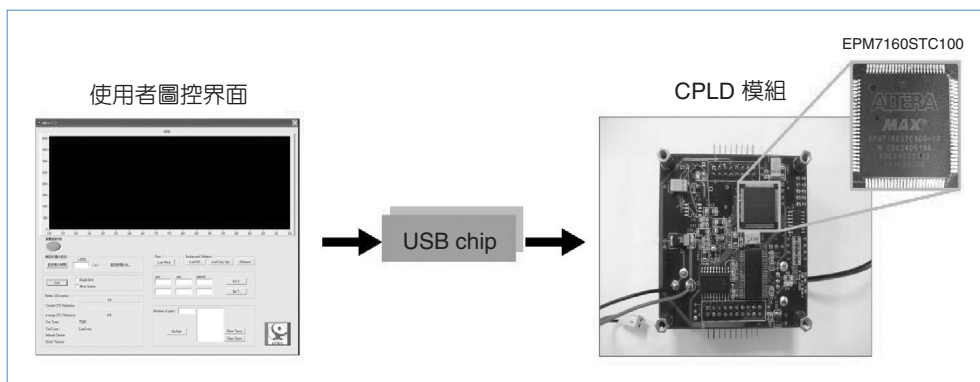


圖 11. 硬體系統架構圖。

寫硬體描述語言 (hardware description language) 產生所需的時脈波型，再經由 Altera 之發展軟體 Quartus II 模擬與實現燒錄至 EPM7160STC 晶片上。

(2) 時脈電路架構設計

近紅外光譜儀時脈電路架構設計共有三個主要需求，如下所示：

- ① 整個模組接上電源後，能馬上自行產生一組積分時脈，並持續曝光循環。
- ② 當使用者更改積分時間後，能馬上反應在下一個循環。
- ③ 在感測器容許範圍內，無段式可調的積分時間。

電路架構方塊圖如圖 12 所示，以下將詳述各方塊功能，並說明如何達成時脈電路所需之三樣需求。

(a) 除頻器 (Frequency Divider)

接受系統震盪器所提供 20 MHz 之系統時脈 (clk)，並將其除頻後，產生 625 kHz 的基頻訊號 (sensor_clk)，傳送給下一步狀態機 (FSM) 使用。

(b) 狀態機 (Finite State Machine)

如圖 13 所示，為了解決第一個需求，程式中撰寫了一個 IDLE 狀態，在每次開啟電源後，會先進入這個狀態並自動寫入一個曝光值 (Integrat counter)，然後 fsm_enable 旗標自動會設為 1，接著進入設定積分時間 (setting integration time) 狀態。因為第一次進入這個狀態，而且先前一個 IDLE 狀態已經設定過曝光值了，所以會直接進入

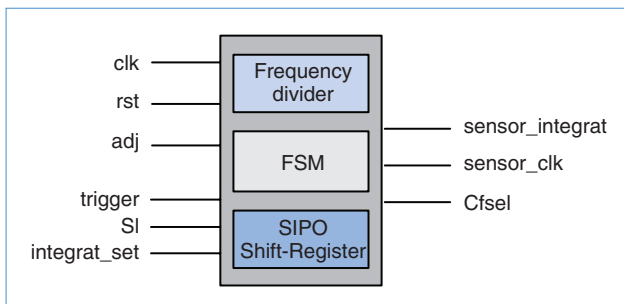


圖 12. 電路架構方塊圖。

積分時間 (integration time) 狀態，產生積分時脈訊號給感測器，並依序遞減 Integrat counter 至 0 為止。接著進入讀出時間 (readout time) 狀態，此狀態用來計數感測器倒出電子的時間，倒出時間固定為 4.8 ms，當電子倒完之後，又回到設定積分時間狀態接受新的曝光值指令，如果沒有新的曝光值指令，則維持原曝光值繼續曝光循環。以上設計也滿足了第二個需求。

(c) 串進並出位移暫存器 (Serial In Parallel Out Shift Register)

此區塊用於接收使用者所輸入的積分時間，由於 USB chip 封裝 pin 腳數的限定，扣除傳輸資料所需的接腳後，可用於傳輸積分時間指令的接腳只剩三支，為了滿足第三個需求—無段式可調的積分時間，採用串進並出的接收方法，以實現無段可調的需求。串列傳輸資料最大的設計重點，在於電腦傳送與 CPLD 接收資料間的同步問題，由於 CPLD 提供的邏輯閘數有限，故能改變之積分時間範圍也因此受限，系統最後選定 1 ms—6700 ms 為積分時間區間 (0.0016 ms 為一個基頻時脈週期，即 625 kHz)，以 1 ms 為 1 個 step 做積分時間的微調。如圖 12 所示，電路設定一支接腳為 integrat_set，一支接腳為 trigger，另一支接腳為積分設定值 SI (由程式設定之積分時間)。當 integrat_set = 1 時，暫存器接收電腦所傳來的積分設定值 (SI)，反之，則維

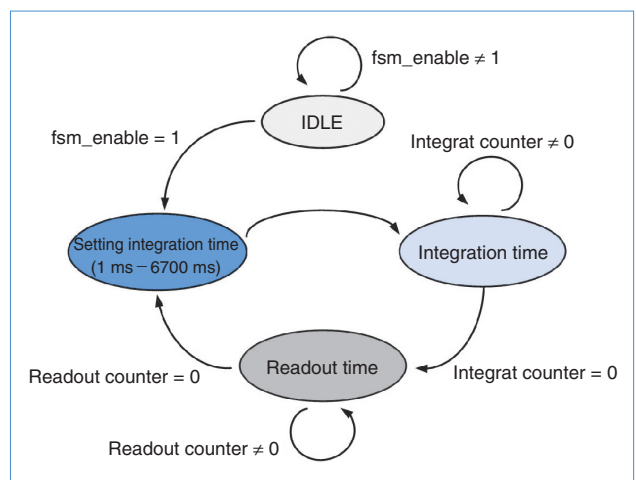


圖 13. 狀態機。

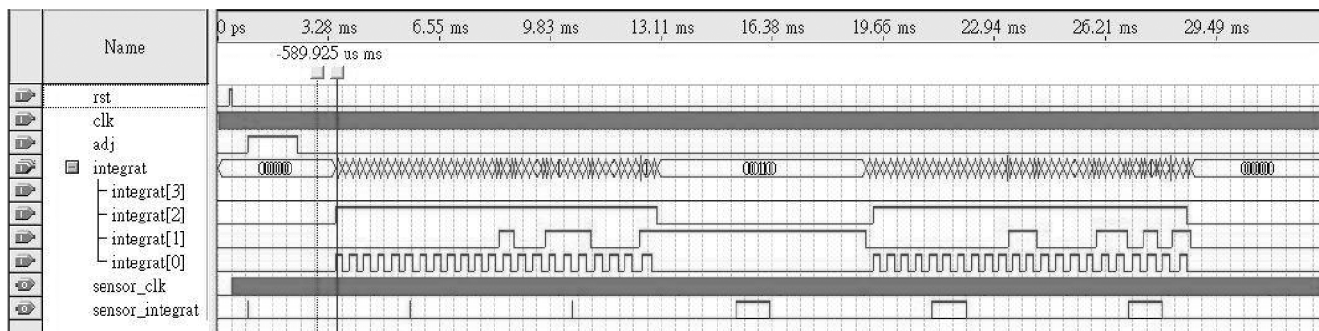


圖 14. 無段式積分時間設計的電路模擬結果。

持原積分值 (default 值為 0.0016 ms)，光譜儀操作時 CCD 即可依接收到的積分設定時間來積分訊號。Trigger 接腳用來告知 CPLD 何時該同步取樣，並利用程式中一個 counter = 1 的倒數計數器，每當 trigger 訊號上升緣時，電路就取樣一次，倒數計數器並自動減 1 直到 counter = 0，如此一來，便達到電腦與 CPLD 同步的目的。

(3) 測試與結果

電路模擬結果如圖 14 所示，符合近紅外光譜儀感測器所需之時脈輸入規劃。圖 14 中 clk 為系統時脈頻率為 20 MHz。Rst 為系統重置訊號，當其為高位準 (high) 時，系統將重置所有的訊號全部歸零。sensor_clk 為 clk 經過除頻器後所產生的基頻信號，頻率為 625 kHz (每個 cycle 週期為 0.0016 ms)；integrat[0] 為串進並出位移暫存器的 trigger 訊號，此處使用了 22 位元可表示 0.0016 ms—6710 ms，符合 1—6700 ms 的積分時間需求；integrat[1] 為積分時間串列輸入訊號 (SI)；integrat[2] 為 integrat_set 訊號，high 的時候接受新的積分時間，反之，則維持原積分時間；sensor_integrat 為輸出給感測器的驅動訊號。以上測試結果符合一開始所設定的三項需求。

四、近紅外光譜儀測試

1. 光譜解析度

儀科中心整合光機電技術，開發出一款波長範圍介於 900 nm 到 1700 nm 的近紅外光譜儀。由於氬光源在近紅外區域具有多個特徵波長，很適合作

為近紅外區域的波長校正用光源。圖 15 顯示自製近紅外光譜儀經過波長校正後所顯示之氬光源的近紅外光譜。圖中最靠近 900 nm 有一高一低之兩個特徵波峰，分別代表 912 nm 及 922 nm，此二波峰可以明顯的分離開來，由此可知，該儀器之光譜解析度小於 10 nm。經實測波長 912 nm 及 966 nm，其光譜解析度為 6 nm FWHM (full width half maximum)，最後再以波長 1064 nm 的雷射光作確認測試，亦得到 6 nm FWHM 的光譜解析度。

2. 波長準確性

至於波長準確性的驗證，在自製近紅外光譜儀經過波長校正後，以雷射光作為驗證光源，考量適合近紅外區域之雷射光，最後選取波長為 1064 nm 的 Nd:YAG 雷射作為輸入光源來測試近紅外光譜儀波長之準確性。由於本儀器使用的感測器像素為 256 個像素，波長範圍為 900 nm—1700 nm，理論上，感測器的解析度 = $800 \text{ nm} / 256 \text{ pixel} = 3.125 \text{ nm}$ ，誤差值為 $\pm 3.125 \text{ nm} / 2 = \pm 1.56 \text{ nm}$ 。實際上測試結果如圖 16 所示，X 座標軸上顯示為 1065

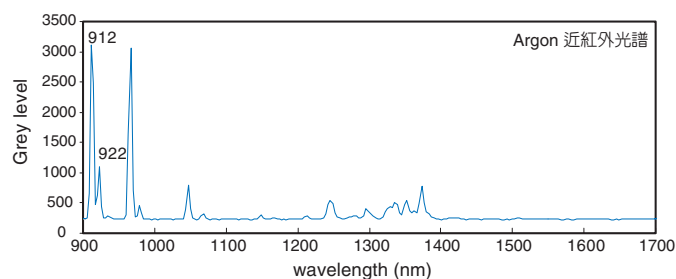


圖 15. 儀科中心開發之近紅外光譜儀測試氬燈源之近紅外光譜。

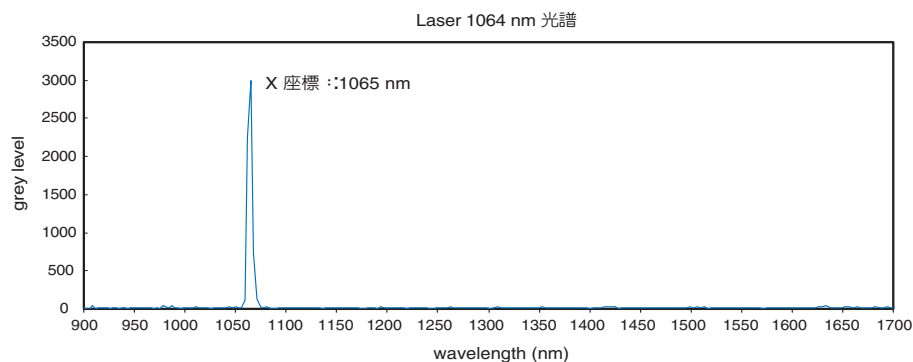


圖 16.
波長準確性測試。

nm, $1065 \text{ nm} \pm 1.56 \text{ nm} = 1063.44 \text{ nm} - 1066.56$, 包含 1064 nm 在內, 以理論誤差值而言, 波長的準確性是十分正確的。

3. 吸收率—畢耳定律

近紅外光譜在作定量分析時, 遵從畢耳定律 (Beer's law) (參見圖 17)。以方程式表示如下:

$$T = \frac{I_1}{I_0} = 10^{-\alpha l c} \quad (1)$$

其中, T 為穿透率, I_1 為光束通過物質後的強度, I_0 為入射光束的強度, α 為吸收係數, l 為物質厚度, c 為物質濃度。定義物質的吸收率為

$$A = -\log T = \log\left(\frac{1}{T}\right) = -\log\left(\frac{I_1}{I_0}\right) \quad (2)$$

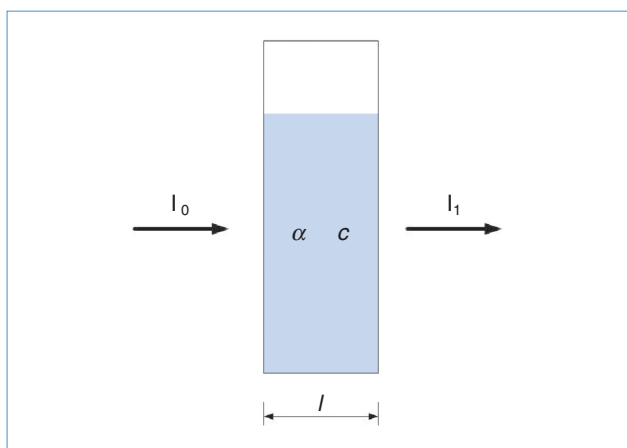


圖 17. 畢耳定律示意圖。

若使用反射率作指標, 反射效果類似於穿透⁽⁸⁾, 更有人提出, 反射率 R 與穿透率 T 在近紅外波段扮演相同角色⁽⁹⁾。因此方程式 (2) 可以改寫成:

$$A = -\log R = \log\left(\frac{1}{R}\right) = -\log\left(\frac{I_1}{I_0}\right) \quad (3)$$

在吸收率測試方面, 由於大部分液體為水溶液, 水的吸收光譜對液體影響很大, 以本儀器單獨測試水的吸收光譜, 以光纖收光, 經計算後, 以 $\log(1/T)$ 為縱軸, 波長為橫軸, 結果表示如圖 18。水的吸收光譜在 $900 \text{ nm} - 1700 \text{ nm}$ 範圍內有三個峰值, 分別在 $900 \text{ nm} - 1000 \text{ nm}$ 、 $1100 \text{ nm} - 1200 \text{ nm}$ 及 $1400 \text{ nm} - 1500 \text{ nm}$ 之間, 尤其是在 $1400 \text{ nm} - 1500 \text{ nm}$ 範圍, 水對光的吸收極強。

針對塑膠類的吸收光譜測試, 選擇壓克力作為

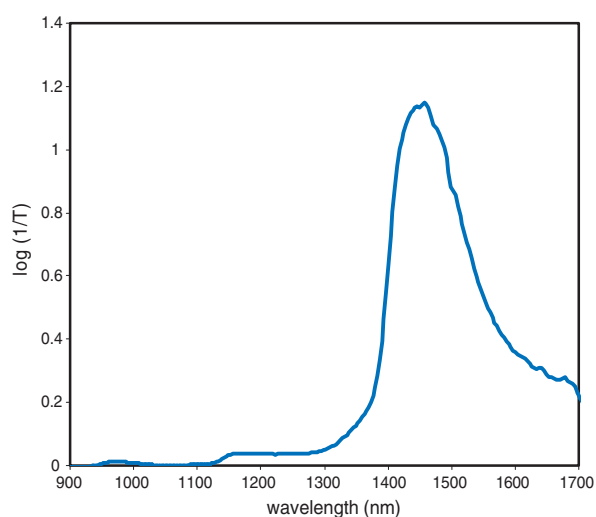


圖 18. 使用本儀器測試水之吸收光譜。

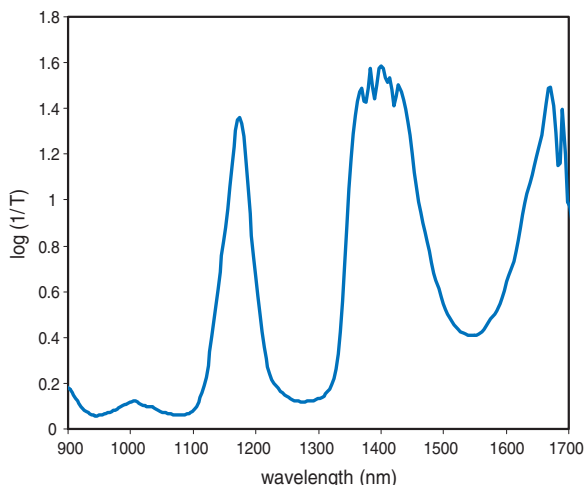


圖 19. 使用本儀器測試塑膠類壓克力之吸收光譜。

測試樣品，同樣以鎢絲—鹵素燈源作為光源，光纖收光，以 $\log(1/T)$ 為縱軸代表吸收率，波長為橫軸，結果如圖 19 所示。壓克力除了在 1100 nm—1200 nm 與 1400 nm—1500 nm 有較強之吸收率之外，在靠近 1600 nm—1700 nm 存有另一較強之吸收值。將不同塑膠類材質作為待測試之樣品，分別取得吸收光譜，經數值分析計算後，可以作為回收塑膠分類之一大利器。

五、應用

近紅外光譜分析由於早期的儀器性能不佳及光譜特徵不容易解讀，沉寂了一段時間，一直到美國農業部門在農產品分析獲得突破，才又開始受到人們的重視。1980 年代由於電腦技術的進步與新的統計分析方法問世，使得近紅外光譜分析技術由原先之農業領域大幅擴展至化學、高分子、石化與製藥工業等。近紅外光譜分析技術之應用，國內外已有眾多的學術研究與討論，並且已有成功的案例，只是目前在國內業界的實際使用並不多見，未來在應用上還有很大的成長空間。以下就四大領域的應用作一簡單介紹。

1. 農業與食品加工業

國立台灣大學針對高級水果梨⁽¹⁰⁾及水蜜桃果汁⁽¹¹⁾進行近紅外光譜分析預測，梨的二次差分光

譜所建立的糖度校正線的 R (相關係數) 為 0.92，SEC (standard error of correction) 與 SEP (standard error of prediction) 分別為 0.48 與 0.49 Brix，認為對梨的糖度有好的預測能力。而對水蜜桃果汁的預測，其判定係數 (r^2) 更高，SEP 與 SEC 更低， r^2 為 0.974，SEC = 0.268，SEP = 0.271。

2. 漁牧業

在家禽家畜及水產養殖業的飼料中常常添加魚粉作為蛋白質補充劑，可以補充動物所需之胺基酸，但是品質不良的魚粉常含有高量之組織胺，容易造成養殖魚類表面皮膚損傷，易受黴菌感染而生病，人類食用後易造成組織胺中毒現象。傳統組織胺的分析方法有層析法、酵素法及呈色法，以近紅外光譜分析可以提供更為快速的非破壞性檢測⁽¹²⁾。國立海洋大學以多個分析模式來處理光譜訊息，得到以二次微分部分特徵吸收波段 MPLSR (modified partial least square regression) 計算模式方法可以得到 $r_c = 0.95$ 、SEC = 22.67 ppm、SEP = 36.21 ppm，其與原始光譜及一次微分比較， r_c 分別提高 12% 以及 6%，校正標準誤差降低 14 ppm 以及 8 ppm，所以光譜二次微分處理後可以強化組織胺之特徵波段。

3. 石化工業

石化工業領域的研究⁽¹³⁻¹⁴⁾，以測試辛烷值為主之近紅外光譜分析技術已漸成為石化公司的測試方法之一⁽¹⁵⁻¹⁶⁾。國內台灣中油公司也將其應用在實驗室快速品管分析汽油之辛烷值、苯、芳香烴等和汽油摻配製程線上檢測，可以縮短採樣測試時間，達成線上同步監控之目的。

4. 高分子工業

現今塑膠製品的使用十分廣泛，尤其在電子電器、汽車、飲料罐及其他日常生活用品，每年消耗的塑膠製品十分驚人，已經嚴重影響到地球環境與生態，未來世界各國必定對廢舊塑膠製品的回收訂定嚴格的標準，台灣為出口導向的國家，宜及早因應。世界各國也在著手研究開發以近紅外光譜儀為主之廢舊塑膠檢測方法⁽¹⁷⁻¹⁸⁾及線上自動化分類系

統。充分回收再利用塑膠製品，不僅可以創造出新的產業，同時還可以減輕環境污染之壓力，開創永續發展之契機。

六、結語

雖然近紅外光譜分析技術在近年來發展迅速，逐漸應用在各工業領域之品管檢測及線上製程即時監測，但是要能充分應用近紅外光譜分析技術之優點，使用者還需要非常熟悉化學計量學的校正模型建立與評估方法。目前美國 ASTM 也陸續公布相關之定性與定量標準應用⁽¹⁹⁻²⁰⁾，可以提供給使用者作為參考依據。

儀科中心開發此近紅外光譜儀，一方面是希望能達成儀器國造之目標，可將此技術移轉國內廠商，以提升儀器自製水平，或是生產製造，以降低售價，達成在國內推廣近紅外光譜分析技術之應用，可提供相關應用產業之即時檢測與提升產品之附加價值。另一方面是希望可帶動國內關鍵性零組件的開發，如近紅外感測器及光學元件等，共同促進相關產業整體之發展。

參考文獻

1. D. Malley and P. Williams, *NIR News*, **16** (7), 20 (2005).
2. R. O. Pierce, D. B. Funk, and C. A. Brenner, *NIR Publications*, Chichester, 451 (1996).
3. F. Davrieux, J. C. Manez, N. Durand, and B. Guyot, *Proceedings of the 11th International Conference*, NIR Publications, Chichester, 441 (2004).
4. L. R. Schimleck, A. J. Michell, C. A. Raymond, and A. Muneri, *J. Near Infrared Spectrosc.*, **6**, A117 (1998).
5. D. A. Skoog, *Principles of Instrumental Analysis*, Saunders College Publishing, 4th ed. (1992).
6. H. H. Willard, *Instrumental Methods of Analysis*, Wadsworth Publishing Co., 7th ed. (1988).
7. D. A. Burns and E. W. Ciurczak, *Handbook of Near-Infrared Analysis*, 2nd ed. (2001).
8. I. Murray and P. C. Williams, *Chemical Principle of Near-Infrared Technology*, In: *Near-Infrared Technology in The Agricultural and Food Industries.*, ed. by P. C. Williams and K. H. Norris, American Association of Cereal Chemists, 17 (1990).
9. G. S. Birth and H. G. Hecht, *The Physics of Near Infrared Reflectance*, In: *Near-Infrared Technology in The Agricultural*

and Food Industries, ed. by P. C. Williams and K. H. Norris, American Association of Cereal Chemists, 8 (1990).

10. 陳致平, 蕭介宗, 農業機械學刊, **8** (1), 49 (1999).
11. 陳世銘, 張文宏, 謝廣文, 農業機械學刊, **7** (3), 41 (1998).
12. 郭淑貞, 近紅外光技術應用於魚粉中組織胺測定之可行性探討, 國立海洋大學碩士論文 (2005).
13. 余新銘, 第六屆石油和石油化工系統光譜分析技術報告會論文集, 149 (2002).
14. 王麗豔, 李述忠, 第六屆石油和石油化工系統光譜分析技術報告會論文集, 146 (2002).
15. 廖權能, 標準與檢驗, **56**, 14 (2003).
16. 蕭玉玫, 陳政延, 陳濟瑜, 樊汝麗, 李正誠, 石油季刊, **35** (2), 9 (1999).
17. R. Feldhoff, D. Wienke, K. Cammann, and H. Fuchs, *Applied Spectroscopy*, **51** (3), 362 (1997).
18. T. Huth-Fehre, R. Feldhoff, T. Kantimm, L. Quick, F. Winter, K. Cammann, W. van den Broek, D. Wienke, W. Melssen, and L. Buydens, *Journal of Molecular Structure*, **348**, 143 (1995).
19. Practice E1655-94, Standard Practices for Infrared Multivariate Quantitative Analysis, ASTM Annual Book of Standards, **03.06**, American Society for Testing and Materials West Conshohocken PA (1995).
20. Practice E1790-96, Standard Practices for Near Infrared Qualitative Analysis, ASTM Annual Book of Standards, **03.06**, American Society for Testing and Materials West Conshohocken PA (1996).

- 陳志文先生為國立中央大學機械工程碩士，現任國家實驗研究院儀器科技研究中心副研究員。
- 林群富先生為中原大學電機碩士，現任國家實驗研究院儀器科技研究中心助理研究員。
- 黃泰綸先生為國立中興大學電機碩士，現任國家實驗研究院儀器科技研究中心助理研究員。
- Chih-Wen Chen received his M.S. in mechanical engineering from National Central University. He is currently an associate researcher at Instrument Technology Research Center, National Applied Research Laboratories.
- Chun-Fu Lin received his M.S. in electrical engineering from Chung Yuan Christian University. He is currently an assistant researcher at Instrument Technology Research Center, National Applied Research Laboratories.
- Tai-Lun Huang received his M.S. in electrical engineering from National Chung Hsing University. He is currently an assistant researcher at Instrument Technology Research Center, National Applied Research Laboratories.