

## 近红外光谱检测技术在聚合物领域的应用研究进展

雷 玉, 郭雪媚, 朱世超, 王蒙蒙, 晋 刚\*

华南理工大学聚合物新型成型装备国家工程研究中心, 聚合物成型加工工程教育部重点实验室, 广东 广州 510641

**摘 要** 近红外光谱(NIR)检测技术能够提供样品丰富的结构和组成信息, 且具有分析速度快、样品无需处理等突出特点, 在聚合物领域有了越来越广泛的应用。综述了该技术在聚合物合成到成型加工再到回收利用整个生命周期过程中各个环节的应用研究进展。在聚合物的合成和加工过程中, 近红外光谱检测技术可用于材料参量的定量测量, 且由于光纤良好的化学和热稳定性, 使其能够在强腐蚀、高温、高压等危险环境下进行在线实时监测。对于聚合物合成, 选择聚合反应转化率、聚合产物粒径和聚合物组成三个关键参量, 概述了近红外光谱在线测量上述参量的相关研究进展; 对于聚合物加工, 主要讨论了反应性挤出加工过程中近红外光谱在线测量聚合物分子量、残余单体含量、接枝率等反映材料加工状态参量的应用研究。在聚合物的回收利用过程中, 近红外光谱可用于废旧塑料制品的定性分类识别, 围绕该应用分析了其国内外的研究现状。指出了近红外光谱检测技术在实际应用中存在的问题, 并提出几点建议, 最后对该技术在聚合物领域的发展方向进行了展望, 并认为随着研究工作的深入和在线测量仪器的发展, 近红外光谱检测技术将在聚合物领域有着更加广阔的应用前景。

**关键词** 近红外光谱; 聚合物; 定性和定量分析

**中图分类号:** O657.3 **文献标识码:** R **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)07-2114-05

### 引 言

随着石化工业的发展, 我国聚合物的生产量和消费量逐年增长, 大量的聚合物制品如食品包装、生活用品、农用薄膜等在人们的生活与生产中占据着重要的地位。然而, 聚合物制品的生产中普遍存在产品质量差异大且性能达不到要求的现象, 由于制品性能直接受到合成工艺或加工过程的影响, 因此对生产装置中材料的物理和化学性质进行快速、准确的测量以调控生产过程、提高产品质量显得尤为重要<sup>[1-2]</sup>。此外, 聚合物制品的广泛应用伴随着大量废弃物的产生, 给环境带来的压力日益增大, 因此对废旧塑料的回收再利用受到人们的普遍关注<sup>[3-4]</sup>。塑料分类回收的首要任务在于对混杂塑料进行准确地鉴别和分离<sup>[5]</sup>, 避免将不同种类的废旧塑料混在一起, 导致回收料循环利用时产品性能下降而出现废品, 产生二次污染。

由于近红外光谱检测技术能够实现适应工业化生产需求的非接触无损检测、毫秒级的快速检测, 并伴随光纤等技术的发展而具有实时在线检测的功能, 使该技术在聚合物中的

应用受到越来越多研究者的关注<sup>[6-7]</sup>。目前近红外光谱检测技术在聚合物领域的应用研究主要集中在聚合物合成过程、聚合物加工过程和聚合物种类识别中。

### 1 近红外光谱检测技术在聚合物合成中的应用

光纤传感技术在光谱领域的应用使得近红外区域的光能够通过光纤进行远距离传输, 将光纤探头直接插入到反应装置中可以实现对反应过程的原位分析<sup>[8]</sup>。结合化学计量学, 在线近红外光谱检测技术能够监测整个聚合反应过程, 测量反应过程中单体浓度、聚合物浓度、反应转化率和聚合产物粒径等关键参数, 有利于聚合反应动力学的研究及聚合反应过程的优化和控制。

#### 1.1 聚合反应转化率的在线测量

聚合反应过程中单体浓度和聚合物浓度的改变都会导致近红外光谱特征吸收峰发生变化, 因此将光谱吸光度与转化率建立联系, 可以实现对聚合反应转化率的定量测量。

Rodríguez-Guadarrama<sup>[9]</sup>利用傅里叶变换近红外光谱

收稿日期: 2018-05-20, 修订日期: 2018-10-19

基金项目: 国家重大科学仪器设备开发专项项目(2012YQ230043), 国家自然科学基金面上项目(11572129)资助

作者简介: 雷 玉, 女, 1994年生, 华南理工大学硕士研究生 e-mail: krystal\_ly94@163.com

\* 通讯联系人 e-mail: pmrdd@scut.edu.cn

(FT-NIR)测量技术在线监测丁二烯阴离子聚合反应。研究发现随着反应的进行, NIR 光谱在 1 632 nm 处(乙烯基中碳氢振动)的吸光峰强度逐渐减弱, 利用不同时刻 1 632 nm 处的吸光度大小可定量表征丁二烯的转化率。作者将在线测得的转化率与离线样品分子量之比表征的转化率进行对比, 结果表明在线 NIR 和离线凝胶渗透色谱(GPC)测得的丁二烯转化率相近。

Ambrogio 等<sup>[11]</sup>将近红外透射探头浸入反应介质中, 对苯乙烯(St)细乳液聚合反应的转化率和聚苯乙烯(PS)的平均粒径进行在线测量。结合样品的离线重力测试和动态光散射分析(DLS)结果建立偏最小二乘(PLS)模型, 最终在 5 700~6 200  $\text{cm}^{-1}$  范围内得到苯乙烯转化率的 4 因子最优模型, 该模型外部验证的决定系数(coefficient of determination,  $R^2$ )为 84%, 交互验证均方根误差(root mean square error of cross validation, RMSECV)为 0.11; 并在 7 590~11 700  $\text{cm}^{-1}$  范围内建立了聚合物平均粒径的 6 因子校正模型, 其  $R^2=86\%$ , RMSECV=28.4, 预测结果较准确。由于反应初期测得的聚合物平均粒径减小, 表明除了典型的液滴成核以外, 苯乙烯细乳液聚合过程中还出现了胶束成核或均相成核, 但具体成核机制有待进一步验证, 这也说明利用在线 NIR 光谱技术能够更加深入细致地获得聚合过程信息。

### 1.2 聚合产物粒径的在线测量

聚合产物粒径的变化直接影响聚合体系对近红外光的散射程度, 即散射光信号中包含着聚合产物粒径大小的信息<sup>[11]</sup>。因此结合化学计量学方法提取光谱数据中这部分有用信息, 可在线测量聚合物的平均粒径。

Santos 等<sup>[12]</sup>分析了甲基丙烯酸甲酯(MMA)悬浮聚合反应中实时采集的近红外透射光谱, 发现经二阶导数预处理后的 NIR 光谱吸光度对聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)粒径的变化很敏感, 尤其是在 1 600~1 750 nm 内, 且实验观察到 NIR 光谱在聚合 30 min 后发生突变然后保持稳定, 这与此时强凝胶效应导致的 PMMA 平均粒径快速增加然后趋于恒定的规律相一致。除此之外, 他们还分别测量了两种不同粒径的 PMMA, PS 和 PVC 水悬浮液的 NIR 光谱, 观察到 NIR 光谱对不同聚合物粒径变化的灵敏度不同, 这意味着近红外光谱对粒径的检测能力取决于特定的分析对象。

Chicoma 等<sup>[13]</sup>采用光程长度为 1 mm 的浸入式透射探头, 实时采集苯乙烯乳液均聚和醋酸乙烯酯-丙烯酸正丁酯(VAc-BuA)乳液共聚时的近红外光谱信号, 并据此研究了反应过程中聚合物粒径的变化。选取与聚合物粒子光散射有关的在线 NIR 数据(9 485~12 989  $\text{cm}^{-1}$ )分别对两个聚合反应产物的粒径大小建立 PLS 校正模型, 结果表明对 St 乳液均聚反应建立的最优模型其外部验证  $R^2$  为 0.942 5, RMSECV 为 7.34 nm, 对 VAc-BuA 乳液共聚反应建立的模型  $R^2=0.960 4$ , PMSECV=5.87 nm, 且 NIR 光谱测得的粒径大小都与离线 DLS 测量结果吻合。

Colman 等<sup>[14]</sup>在准确测量了丙烯酰胺(AM)反相微乳液聚合反应转化率的同时, 利用粒子散射效应最强的 NIR 光谱数据(9 500~12 500  $\text{cm}^{-1}$ )建立了聚合产物平均粒径的 PLS 模型, 得到最优模型结果为  $R^2=0.76$ , RMSECV=14.4

nm, 并根据测得的平均粒径对聚合反应过程中粒子成核和聚结等复杂现象进行了分析。这项研究结果表明在反相微乳液聚合反应中使用近红外光谱检测技术同时测量转化率和平均粒径是可行的。

### 1.3 聚合物组成的在线测量

近红外光谱检测聚合物组成的依据是朗伯-比尔定律, 即光程一定时, 吸光度与组分浓度成正比。

Pereira 等<sup>[15]</sup>利用近红外光谱分析技术在线测量醋酸乙酯-丙烯酸(VAc-AA)悬浮共聚反应, 并通过 PLS 法预测悬浮聚合中单体浓度和共聚物的组成。结果表明, AA 浓度的 PLS 模型其预测集相关系数(correlation coefficient,  $r$ )和预测标准偏差(standard error of prediction, SEP)分别为 0.95 和 0.004 9; VAc 浓度的预测结果为  $r=0.90$ , SEP=0.252; 共聚物中 VAc 含量的 PLS 模型其  $r=0.96$ , SEP=0.199。由于 AA 均匀分布在水相中, 而 VAc 单体位于有机液滴内, 液滴表面光散射效应的影响使 VAc 浓度的校正结果比 AA 浓度的校正结果差。尽管如此, 三个模型预测得都较准确, 这证明利用在线 NIR 技术能够实时监测 VAc-AA 聚合反应产物的组成, 为优化反应过程提供指导。

Yi 等<sup>[16]</sup>基于在线近红外光谱检测技术测定 St、丙烯酸丁酯(BA)和 MMA 的半连续种子乳液聚合制备的多层复合粒子其核相、界面层和壳层( $W_c$ ,  $W_i$  和  $W_s$ )的质量分数, 以多频温度调制差示扫描量热法(TOPEM-DSC)测得的各相质量分数为参考, 利用不同聚合时间得到的复合粒子在 6 200~5 600  $\text{cm}^{-1}$  内的 NIR 光谱建立了  $W_c$ ,  $W_i$  和  $W_s$  的 PLS 校正模型, 且模型预测值与 TOPEM-DSC 测量的参考值具有良好的 consistency, 这表明在线 NIR 技术是检测多层复合材料各相组成的有效手段。

近红外光谱分析技术可以对聚合物合成过程进行原位实时检测, 但是在应用时也会受到一些因素的影响, 如反应过程中气泡的产生和搅拌速率不均匀导致的光谱信号不稳定等, 且探头易被污染, 需要定期取出探头进行清理<sup>[17]</sup>; 另外对于以水为溶剂的聚合反应体系, 由于水的近红外光谱吸收较强, 会对聚合物的光谱信号产生一定掩盖和干扰, 因此需要通过选择合适的光程长度, 以保证 NIR 光谱中既能包含较多的测量对象信息, 又能尽量避免水峰的影响, 从而获得信噪比较高的光谱数据。

## 2 近红外光谱检测技术在聚合物反应性挤出中的应用

光纤的热稳定性使得近红外光谱检测技术能够在高温高压的环境下使用, 因此它可以对聚合物加工中熔体的物理和化学变化进行实时跟踪。在线近红外光谱已被用于测定聚合物熔体的许多性质, 如共混物的组成<sup>[18-19]</sup>、填充物的分散均匀性<sup>[20-21]</sup>、熔体密度<sup>[22]</sup>等, 目前, 已有相关研究和综述。这里将主要讨论近红外光谱在线测量技术在反应性挤出过程中的应用。

Furukawa 等<sup>[23]</sup>在同向旋转双螺杆挤出机的模头上安装近红外透射探头, 监测乙烯-乙酸乙酯(EVA)与辛醇在熔

融挤出过程中的酯交换反应。利用带蓝宝石窗口片的光纤探头在挤出机模头采集反应产物(乙烯-乙醇, EVAL)的 NIR 光谱, 对比发现随着时间增加, 产物中—OH 伸缩振动的倍频峰( $7\ 089\ \text{cm}^{-1}$ )有最明显的峰强变化, 因此可根据此处的峰强监测反应程度。且在  $7\ 300\sim 6\ 900\ \text{cm}^{-1}$  内建立了能够预测 EVA 中残余 VA 含量的最优 PLS 模型, 该模型  $r$  和 SEP 分别为 0.96 和 0.85%。Barrès 等<sup>[24]</sup>采用了类似的在线测量装置实时监测乙烯-乙醇(EVOH)共聚物与辛酸的催化酯化反应, 实现了对反应中游离酸、—OH 和酯浓度的准确测量。通过对在线测量数据的分析发现酸碱摩尔比对酯化产率影响小, 而混合效率和停留时间等因素对反应产率影响较大, 这为提高 EVOH 酯化产率提供了指导。

Bergmann 等<sup>[25]</sup>在双螺杆挤出机中利用近红外漫反射光谱在线测量了聚对苯二甲酸乙二醇酯(PET)降解过程中其分子量变化。根据 PET 降解过程中的在线 NIR 光谱和离线体积排阻色谱(SEC)测试结果建立了 PET 分子量的校正模型, 最优 PLS 模型  $r=0.983$ ,  $\text{RMSECV}=612.43\ \text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ , 预测结果与 SEC 分子量测试结果相近。

Moghaddam 等<sup>[26-27]</sup>将近红外光谱仪连接到微型挤出机上, 在线监测马来酸酐(MAH)接枝共聚聚丙烯反应, 以研究其反应机理和反应动力学。谱图分析表明  $6\ 117$  和  $4\ 966\ \text{cm}^{-1}$  处的吸光度与 MAH 浓度有关, 尤其是  $6\ 117\ \text{cm}^{-1}$  处, 它提供了未反应 MAH 浓度或 MAH 接枝到主链程度的信息, 而 PP 骨架上 C—H 振动吸收峰基本保持不变, 因此计算不同时刻  $6\ 117$  和  $7\ 100\ \text{cm}^{-1}$  处的谱带面积之比可定量测量 MAH 浓度, 从而得到反应速率和动力学方程。另一方面, 对实时采集的 NIR 光谱数据进行主成分分析(PCA), 发现第一主成分 PC1 与未反应的 MAH 有关, PC1 得分可代表未反应 MAH 的浓度, 最终由 PC1 得分与时间的关系也得到了反应速率和动力学方程。两种方法的结果相似, 且都证明此接枝反应对 MAH 是一级反应, 反应速率和反应活化能不受引发剂的影响。

上述研究表明, 利用近红外光谱在线测量技术对聚合物反应挤出过程进行实时监测是可行的。它为深入理解反应动力学和热力学、提高反应转化率提供了指导, 但是该技术在实际生产中还不常用<sup>[25]</sup>。且当前研究的反应体系都较为简单, 定量分析大多数采用基于线性回归的 PLS 方法, 而实际加工中聚合物组分更加复杂, 可能需要运用人工神经网络、支持向量机等非线性算法或开发新的算法才能实现准确的定量分析。

### 3 近红外光谱检测技术在塑料识别中的应用

对于各种废旧塑料, 近红外光谱检测技术表现出强大的辨别能力。由于近红外光谱主要反映的是含氢基团 X—H(如 C—H, N—H, O—H 等)振动的倍频和合频吸收, 不同基团或同一基团在不同化学环境中的近红外吸收波长及强度都会有明显差别, 因此在近红外区域不同种类的塑料都有其可捕捉的特征光谱信息, 除了对深色塑料的识别度较低之外几乎能够实现对所有种类塑料的识别<sup>[28-29]</sup>。

Masoumi 等<sup>[30]</sup>建立了一个基于近红外反射光谱的废旧塑料自动化识别和分离系统, 如图 1 所示。当回收塑料废品经过 NIR 光谱仪时, 收集其反射光谱得到样品的化学信息, 若通过的废品为目标树脂—PET 制品时, 空气喷嘴便将其喷射到传送带上, 而其余的样品不受投掷单元的影响, 会因重力掉落到另一条传送带上, 实现目标树脂与其他样品的分离。

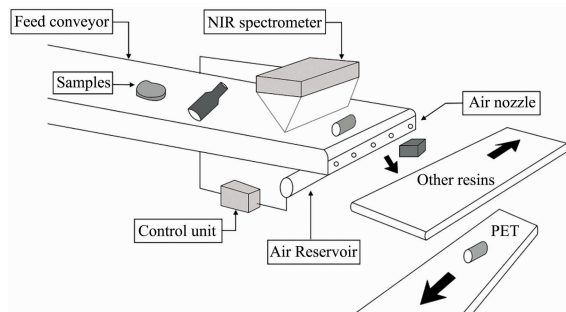


图 1 基于 NIR 光谱的废弃塑料自动识别系统示意图  
Fig. 1 Schematic diagram of auto-identification system for waste plastics based on near-infrared spectroscopy

该系统通过分析 PET、高密度聚乙烯(HDPE)、PVC、聚丙烯(PP)和 PS 5 种树脂制品的近红外反射光谱发现, 对 PET 来说其相对反射率即  $1\ 656$  和  $1\ 724\ \text{nm}$  两个特征峰的比值总是低于 0.8, 而 HDPE 的相对反射率高于 4.7, PVC 的相对反射率为  $1.2\sim 1.7$ , PP 处于  $2.6\sim 4.3$  之间, PS 则在  $0.92\sim 0.98$  之间, 且每种树脂的相对反射率不受样品厚度的影响。这表明只要获得样品光谱的相对反射率就能够有效地识别和分离这 5 种树脂, 且准确率较高。

有研究<sup>[31]</sup>采用不同预处理和分类方法对博物馆历史藏品中的 41 种聚合物如 PS, PVC, PMMA, 聚酰胺(PA), EVA 其近红外光谱进行建模分析, 结果发现标准正态变量变换(SNV)和线性判别分析(LDA)方法相结合得到的模型性能最优, 该模型对其余 32 个聚合物样本的预测准确率达 90%。可见预处理和分类方法不同模型预测结果也不相同, 在具体应用时要根据噪声来源和处理方法的作用与效果进行合理选择。

随着高光谱成像技术的快速发展, 将光谱检测和图像分析相结合进行塑料分类识别的研究越来越多<sup>[32-35]</sup>。Vidal 等<sup>[34]</sup>利用近红外高光谱成像技术对低密度聚乙烯(LDPE), HDPE, PP 和 PS 共 4 种聚合物进行鉴别, 通过偏最小二乘判别分析(PLS-DA)的方法, 最终以 100% 正确率将 PE, PP 和 PS 区别开来, 但 LDPE 和 HDPE 由于分子链结构的相似性使得两者识别准确率低一些。Serranti 等<sup>[35]</sup>开发了一种 NIR 高光谱成像系统, 可以有效识别从废弃建筑物中回收的 PP 和 PE。分别在全谱范围和  $1\ 139, 1\ 167, 1\ 195, 1\ 244, 1\ 328, 1\ 370, 1\ 405$  和  $1\ 587\ \text{nm}$  共 8 个特征波长点采用主成分分析(PCA), 结果表明仅通过 8 个有效波长点便可准确地区分 PP 和 PE, 这也证明 NIR 高光谱成像技术是聚烯烃分类回收和质量控制的有效手段。

在塑料自动鉴别分选装置上使用光谱成像技术, 能够在

获取样本光谱信息的同时得到其空间信息,从而更加全面的对样本进行分析,提高分类的准确性,但是该设备投资较大,数据处理也会更加繁琐。

国内对利用近红外光谱技术鉴别塑料种类也做了一些研究<sup>[36-39]</sup>。Zhao 等<sup>[38]</sup>以 PP、PE、丙烯腈-丁二烯-苯乙烯共聚物(ABS)和 PMMA 四种回收汽车塑料为研究对象,利用近红外光谱分析技术结合 PCA 和 马氏距离判别分析,对它们进行识别分类,结果发现其识别准确率达 97%。张毅民等<sup>[39]</sup>对塑料制品中常见的 ABS, PET, PE, PVC, PP 和 PS 6 种塑料进行研究,提出了一种可实现这 6 种塑料一次性识别的 Fisher 判别模型。他是 对塑料的光谱数据采用 Savitzky-Golay 最小二乘拟合平滑、小波变换后进行 PCA,选择载荷因子最大和最小值对应的特征波长进行 Fisher 判别分析,得到 5 个判别函数式并由此建立分类模型,最终该模型预测集的准确率达 100%,能够快速准确地识别出这 6 种废旧塑料。

由于具有速度快、精度高和非破坏性在线识别的优势,近红外光谱分析技术在塑料分类中的应用研究越来越多。然而目前的研究大多数都是针对单一成分塑料的鉴别分离,在实际应用中会受到很多限制,如何准确识别共混塑料或者填充塑料制品还有待研究。为了将该技术更好的推广应用,还需对识别算法和模型传递方法进行发展和优化,以提高模型准确性,实现仪器间的模型共享。

## 4 展 望

近红外光谱检测技术是实现聚合物快速定性、定量分析

的有效方法,它在聚合物领域有着广阔的应用前景。当然,该技术在应用中也会受到诸多因素的影响如黑色塑料难以鉴别、光谱稳定性差等问题,因此今后还需要从以下几个方面进行研究:

(1) 深入挖掘光谱背后的信息,发现测量参数与光谱特征参数之间的内在联系。目前近红外光谱技术在聚合物领域的应用研究主要是以实验为基础开展的,理论研究还不够深入,例如在线 NIR 光谱与成型工艺条件、近红外吸光度与聚合物分子的结构和形态之间的关系等,这也是将该技术应用于聚合物领域中需深入研究的核心问题。

(2) 化学计量学方法的进一步发展。近红外光谱吸收强度弱,吸收带较宽且重叠严重,通常都要借助化学计量学方法才能提取有用信息,加强对算法的理解有助于合适算法的选用和新算法的发展,从而充分挖掘光谱中的有用信息,拓宽近红外光谱在聚合物领域的应用范围。

(3) 提高测量的准确性与可靠性。在聚合物合成和加工过程中,高温高压及动态的复杂环境易引起检测仪器本身的波动,影响测量结果的准确性,因此需要从技术上提高光谱测量系统的稳定性和可靠性,降低仪器噪声,提高信噪比;此外近红外光谱仪的小型化和专业化对满足工业生产需求也是很有必要的。

随着理论的完善和研究工作的不断深入,近红外光谱在线测量技术将在聚合物领域发挥更大的作用。

## References

- [1] Gosselin R, Rodrigue D, Duchesne C. *Computers & Chemical Engineering*, 2011, 35(2): 296.
- [2] Steinhoff B, Lellinger D, Alig I. *Measurement Science & Technology*, 2010, 21(6): 062001.
- [3] ZHAO Sheng-li, HUANG Ning-sheng, ZHU Zhao-yu(赵胜利, 黄宁生, 朱照宇). *Ecology and Environment(生态环境)*, 2008, 17(6): 2473.
- [4] TANG Gui-lan, HU Biao, KANG Zai-long, et al(汤桂兰, 胡彪, 康在龙, 等). *Renewable Resources and Recycling Economy(废旧塑料回收利用现状及问题)*, 2013, 6(1): 31.
- [5] Carvalho M T, Ferreira C, Portela A, et al. *Waste Management*, 2009, 29(3): 1138.
- [6] Watari M. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2014, 49(6): 462.
- [7] Ozaki Y. *Analytical Sciences*, 2012, 28(6): 545.
- [8] Mukherjee S, Gowen A. *Analytica Chimica Acta*, 2015, 895(3): 12.
- [9] Rodríguez-Guadarrama L A. *European Polymer Journal*, 2007, 43(3): 928.
- [10] Ambrogio P M N, Colmán M M E, Giudici R. *Macromolecular Reaction Engineering*, 2017, 11(4): 1.
- [11] Marie-Francoise Devaux, Nathalie Nathier-Dufour, Paul Roert, et al. *Applied Spectroscopy*, 1995, 49(1): 84.
- [12] Santos J G, Way D V, Melo P A, et al. *Macromolecular Symposia*, 2011, 299-300(1): 57.
- [13] Chicoma D L, Sayer C, Giudici R. *Macromolecular Reaction Engineering*, 2011, 5(3-4): 150.
- [14] Colmán M M E, Chicoma D L, Giudici R, et al. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 2014, 31(4): 925.
- [15] Pereira H L, Machado F, Lima E L, et al. *Macromolecular Symposia*, 2011, 299-300(1): 1.
- [16] Yi Minhua, Qiu Teng, Okubo M, et al. *Vibrational Spectroscopy*, 2018, 95: 23.
- [17] LU Wan-zhen(陆婉珍). *Near Infrared Spectrometer(近红外光谱仪器)*. Beijing: Chemical Industry Press(北京: 化学工业出版社), 2010.
- [18] Barnes S E, Brown E C. *Applied Spectroscopy*, 2005, 59(5): 611.
- [19] Mclauchlin A R, Ghita O, Gahkani A. *Polymer Testing*, 2014, 38(18): 46.
- [20] Fischer D, Müller J, Kummer S, et al. *Macromolecular Symposia*, 2011, 305(1): 10.

- [21] Barbas J M, Machado A V, Covas J A. *Journal of Applied Polymer Science*, 2013, 127(6): 4899.
- [22] Watari M, Higashiyama H, Mitsui N, et al. *Applied Spectroscopy*, 2004, 58(2): 248.
- [23] Furukawa T, Kita Y, Sasao S, et al. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2002, 10(1): 195.
- [24] Claire B, Flavien M, Alain M. *Polymer Engineering & Science*, 2006, 46(11): 1613.
- [25] Bergmann B, Becker W, Diemert J, et al. *Macromolecular Symposia*, 2013, 333(1): 138.
- [26] Moghaddam L, Rintoul L, Halley P J, et al. *Polymer Testing*, 2012, 31(1): 155.
- [27] Moghaddam L, Martin D J, Halley P J, et al. *Vibrational Spectroscopy*, 2009, 51(1): 86.
- [28] Mauruschat D, Plinke B, Aderhold J, et al. *Wood Science & Technology*, 2016, 50(2): 313.
- [29] Brunner S, Fomin P, Ch K. *Waste Management*, 2015, 38(1): 49.
- [30] Masoumi H, Safavi S M, Khani Z. *International Journal of Mechanical and Industrial Engineering*, 2012, 6(5): 213.
- [31] Šuštar V, Kolar J, Lusa L, et al. *Polymer Degradation & Stability*, 2014, 107(4): 341.
- [32] Zheng Yan, Bai Jiarui, Xu Jingna, et al. *Waste Management*, 2018, 72: 87.
- [33] Serranti S, Gargiulo A, Bonifazi G. *Advanced Environmental, Chemical, and Biological Sensing Technologies*, 2012, 8366: 1.
- [34] Vidal M, Gowen A, Amigo J M. *NIR News*, 2012, 23(1): 13.
- [35] Serranti S, Gargiulo A, Bonifazi G. *Resources Conservation & Recycling*, 2012, 61(4): 52.
- [36] DU Jing, SUN Zhi-feng, WANG Hao(杜 婧, 孙志锋, 王 浩). *Transducer and Microsystem Technologies(传感器与微系统)*, 2011, 30(9): 98.
- [37] TAN Yao, WANG Qun-wei, WANG Hao(谭 曜, 王群威, 王 豪). *China Plastics Industry(塑料工业)*, 2009, 37(9): 57.
- [38] Zhao Qinghua, Chen Ming. *Analytical Letters*, 2015, 48(2): 301.
- [39] ZHANG Yi-min, BAI Jia-ruì, LIU Hong-sha, et al(张毅民, 白家瑞, 刘红莎, 等). *Engineering Plastics Application(工程塑料应用)*, 2014, (5): 75.

## Application Progress of Near-Infrared Spectroscopy in the Polymer Field

LEI Yu, GUO Xue-mei, ZHU Shi-chao, WANG Meng-meng, JIN Gang\*

National Engineering Research Center of Novel Equipment for Polymer Processing, The Key Laboratory of Polymer Processing Engineering of Ministry of Education, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China

**Abstract** Near-infrared (NIR) spectroscopy analytical technology has been applied more and more widely in polymer field, since it can provide rich information about structure and composition of samples, and has the prominent feature of fast analysis without dealing with the sample. This article reviewed the research progress of the application of NIR spectroscopy in all aspects in polymer's entire life, which involves polymer synthesis, processing and recycling. NIR analytical technology can be used in quantitatively measurement of important material parameters during the polymer synthesis and processing, what's more, due to the good chemical and thermal stability of the optical fiber, it can realize the in-line real-time measurement in environment with strong corrosion, high temperature and high pressure. As for polymer synthesis, the research progress in real-time measurement of polymerization conversion, polymer particle size and copolymer composition with NIR spectroscopy was discussed. With regard to polymer processing, the discussion on application of NIR spectroscopy for in-line measurement of important parameters which reflects the processing state of the material during the reactive extrusion process, such as the polymer molecular weight, the content of residual monomer and the polymer grafting degree, was mainly made. In the recycling of plastics, NIR can be applied for the qualitative classification and identification of waste plastic products, the article analyzed the research status of this application at home and abroad. In addition, the problems in the application of NIR analytical technology in polymer analysis and corresponding suggestions were pointed out. Finally, the development direction of this technology in polymer field was discussed. It is believed that, NIR spectroscopy will have a wider application prospect in polymer field with the deepening of research work and the development of in-line measurement instruments.

**Keywords** Near-infrared spectroscopy; Polymer field; Qualitative and quantitative analysis

(Received May 20, 2018; accepted Oct. 19, 2018)