

doi:10.3969/j.issn.1001-3539.2026.02.021

近红外光谱建模法测定尼龙66物性指标

程丽云¹, 王志军¹, 顾丰睿¹, 张宁¹, 范长春²

(1.上海中化科技有限公司, 上海 201210; 2.宁夏瑞泰科技股份有限公司, 宁夏中卫 755103)

摘要: 在尼龙66的生产过程中,提升物性检测效率有助于减少牌号切换过程中产生的过渡物料,进而降低生产成本并加快研发进程。相对黏度与相对分子量是产品生产及研发过程中的关键指标,然而传统的乌氏黏度计法与凝胶渗透色谱法存在检测周期长、效率低下、检测成本高及环保性欠佳等局限。本研究开发了基于近红外光谱(NIR)的快速检测方法,采用了区别于传统建模软件的S-Cal国产自主高效建模软件构建了较佳的预测模型,经建模软件自主计算筛选最佳的预处理方法、建模波段选择等参数。通过剔除残差大的校正点,并使用决定系数(R^2)、交叉验证均方根误差(RMSECV)等数据对模型性能进行评价和验证进而得出预测能力较强的最佳模型,包括相对黏度校正模型($R^2=0.948$, RMSECV 为 0.246)、数均分子量校正模型($R^2=0.948$, RMSECV 为 4 058)和重均分子量校正模型($R^2=0.952$, RMSECV 为 8 859)。验证结果表明,该方法具有良好的准确性,预测值与参考值相对误差小于10%,模型同样具备较好的重复性,相对标准偏差(RSD)均不超过8%,企业引进该检测方法,能够满足生产现场的快速检测需求。

关键词: 近红外光谱;快速检测;模型预测;尼龙;相对黏度;相对分子量

中图分类号: TQ317.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3539(2026)02-0167-07

Determination of physical properties of nylon 66 by near-infrared spectroscopy modeling

CHENG Liyun¹, WANG Zhijun¹, GU Fengrui¹, ZHANG Ning¹, FAN Changchun²

(1. Shanghai Sinochem Tech. Co., Ltd., Shanghai 201210, China; 2. Ningxia Ruitai Technology Co., Ltd., Zhongwei 755103, China)

Abstract: In the production of nylon 66, improving the efficiency of physical properties detection helps reduce transition material generated during grade switching, thereby lowering production costs and accelerating research and development processes. Relative viscosity and relative molecular weight are critical parameters in both production and development of products. However, conventional methods, such as Ubbelohde viscometry and gel permeation chromatography, are limited by long testing cycles, low efficiency, high cost, and poor environmental compatibility. In this study, a rapid detection method based on near-infrared spectroscopy (NIR) was developed. A high-performance domestic modeling software, S-Cal, distinct from traditional modeling tools, was employed to build optimized prediction models. The software automatically calculated and screened the optimal preprocessing methods, spectral wavenumber ranges, and other modeling parameters. Through removing outliers with large residuals from the calibration set, the model performance was evaluated and validated using data including the coefficient of determination (R^2), root mean square error of cross-validation (RMSECV), and the optimal model with strong predictive capability was obtained, including the relative viscosity calibration model with R^2 of 0.948 and RMSECV of 0.246, the number-average molecular weight model with R^2 of 0.948 and RMSECV of 4 058, and the weight-average molecular weight model with R^2 of 0.952 and RMSECV of 8 859. Validation results show that the method delivers high accuracy, with prediction relative error within 10% of reference values. The models also demonstrate good repeatability, with relative standard deviations (RSD) consistently below 8%. Implementation of this approach in industrial settings can meet the demand for rapid on-site detection in production environments.

Keywords: near-infrared spectroscopy; rapid detection; model prediction; nylon; relative viscosity; relative molecular weight

通信作者: 王志军, 硕士, 从事高分子材料的分析与检测研究

收稿日期: 2025-11-06

引用格式: 程丽云, 王志军, 顾丰睿, 等. 近红外光谱建模法测定尼龙66物性指标[J]. 工程塑料应用, 2026, 54(2): 167-173.

CHENG Liyun, WANG Zhijun, GU Fengrui, et al. Determination of physical properties of nylon 66 by near-infrared spectroscopy modeling [J]. Engineering Plastics Application, 2026, 54(2): 167-173.

在尼龙66(PA66)工业化生产过程中,不同牌号产品之间的切换操作会不可避免地产生过渡物料,这部分物料在产品成本构成中占据显著比重。特别是在连续化生产线上,过渡物料的产生量直接取决于质量检测耗时,缩短检测时间可实现更精准的切换时机判断,从而有效减少过渡物料产生,实现生产成本优化。

相对黏度作为PA66产品关键的物性参数指标之一,其国内外的现行检测主要依据乌氏黏度计法,参见GB/T 12006.1-2009、GB/T 38138-2019、ASTM D789-19、ISO 307:2019等标准。该方法的前处理较为繁琐,需将样品溶解于甲酸或浓硫酸等溶剂体系,经过特定条件下的长时间溶解后,方可进行乌氏黏度测定。

相对分子量作为产品研发过程中至关重要的参数,目前国内外均采用凝胶渗透色谱(GPC)技术进行表征^[1-2]。由于聚酰胺类材料溶解性的限制,需以六氟异丙醇作为溶剂和流动相,且样品需在常温条件下经历12 h以上的溶解过程。

相对黏度与相对分子量的传统检测方法存在以下共性缺陷:(1)分析周期冗长,主要耗时于样品溶解阶段;(2)操作流程复杂,包括样品前处理、仪器清洗及系统平衡等多个耗时环节;(3)涉及强腐蚀性、有毒试剂的频繁使用,存在安全隐患和环境风险。

近红外光谱(NIR)建模分析技术^[3-4]是综合运用了计算机技术、光谱技术和化学计量学等多个学科发展起来的一项现代分析技术。它以其独特的高效、快速、成本低、环保等突出优点,正在被广泛应用于食品^[5-6]、化工^[7-10]、生物医药^[11-12]等领域。如罗晓霞等^[7]采用NIR分析技术分别建立了硅酮中白油的聚类模型和含量预测模型,张姝等^[8]建立了一种基于NIR建模法测定聚乙烯醇的醇解度的方法。

本研究创新性地建立了基于NIR的PA66相对黏度与相对分子量快速检测方法,该类用于检测尼龙物性指标的方法未有过研究报道。通过运用化学计量学中的偏最小二乘(PLS)算法^[13],构建了光谱数据与物性参数之间的定量预测模型。该方法具有以下显著优势:检测周期缩短至1 h以内;建模完成后可实现高通量检测;大幅降低设备投入和耗材成本;显著提升检测过程的安全性和环保性。本技术的应用将有效优化产品质量控制体系,在人力成

本、设备维护和物料消耗等方面产生显著的经济效益。

本研究采用了S-Cal国产自主的NIR建模软件,它与传统建模软件(如赛默飞TQ Analyst)对比有明显的优势。使用传统建模软件,用户需对光谱进行模型变量数^[14]、建模波段、预处理方法^[15]等参数的设置,然后再建立模型,用户需投入较多时间对预处理方法、建模波段、模型变量数等参数进行组合筛选^[16],进而得出较优的模型。而S-Cal建模软件具备较强的运算能力,在软件中导入光谱与数据后,无需对多个参数进行选择,可自动优化筛选得到多个不同建模参数下的模型列表,用户可根据需求筛选较佳模型,操作简单高效快捷。

1 实验部分

1.1 主要原材料

六氟异丙醇:纯度 $\geq 99.5\%$,阿拉丁试剂(上海)有限公司;

三氟乙酸钾:分析纯 $\geq 98\%$,阿拉丁试剂(上海)有限公司;

浓硫酸:96% $\pm 0.2\%$,国药集团化学试剂有限公司;

聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)标准品:PL 2020-0201,安捷伦科技有限公司;

PA66切片颗粒批次样品:相对黏度2.4~6.5,包括上海中化科技有限公司的实验室制备样品和宁夏瑞泰科技股份有限公司的工厂样品。

1.2 主要仪器及设备

电子天平:ML204T,梅特勒托利多科技(中国)有限公司;

电子天平:XPR205,梅特勒托利多科技(中国)有限公司;

乌氏黏度测量系统(配精密恒温水槽):IVS300,杭州中旺科技有限公司;

GPC仪:1260,安捷伦科技有限公司;

NIR仪:Master10-S,荧飒光学科技(上海)有限公司;

S-Cal建模软件:荧飒光学科技(上海)有限公司。

1.3 参考值的测定

1.3.1 相对黏度参考值的测定

参考GB/T 12006.1-2009测试相对黏度,按式(1)计算。

$$\eta_r = \frac{t}{t_0} \quad (1)$$

式中: η_r 为相对黏度; t 为溶液流出时间平均值; t_0 为溶剂流出时间平均值。

1.3.2 相对分子量参考值的测定

测试条件:色谱柱为两根PL1114-6900 HFIP柱串联;流动相为含0.02 mol/L三氟乙酸钠的六氟异丙醇溶液;进样量10 μ L;流速为0.35 mL/min;柱温为40 $^{\circ}$ C;检测器温度为40 $^{\circ}$ C。

标准品溶液配置:采用PMMA混合标准品,溶剂为六氟异丙醇,浓度为1.5 mg/mL。三组PMMA标准品的分子量分别为565、7 270、74 000、536 500 g/mol, 885、13 630、130 000、1 238 000 g/mol, 1 820、33 240、339 300、1 795 000 g/mol。

待测样品溶液配置:称取样品约10 mg,加入4 mL含0.02 mol/L三氟乙酸钠的六氟异丙醇溶液。

测试完成后,使用仪器配套的软件对标准溶液和待测溶液曲线进行处理,得到待测样品的相对分子量数据。

1.4 校正模型的建立与验证

1.4.1 NIR测试

光谱采样条件:扫描范围11 500~4 000 cm^{-1} ,分辨率8 cm^{-1} ,扫描次数16次,吸收光谱,增益2X。校正模型建立和验证样品均采集2个平行样的NIR数据。

1.4.2 校正模型建立与验证

(1)校正模型建立。

采用S-Cal 荧飒自主专利建模软件,将82批次校正集样品的相对黏度及相对分子量参考值与NIR数据逐一关联,通过设定建模参数,构建PA66相对黏度及相对分子量的多元定量校正模型。

建模参数包括求导平滑窗口、模型变量数及光谱预处理方法、建模波段选择等,基于PLS算法构建校正模型。参数条件的差异会导致建模效果的不同,基于模型的评价与验证结果,可对参数进行进一步的优化。预处理方法包含散射校正、平滑、Savitzky-Golay求导(SG导数)、中心化^[14]等。模型变量数指的是光谱数据因子分解重构后的维数,变量数不足会导致欠拟合[变量数<3时决定系数(R^2)显著降低],过大则引发过拟合。

确定参数后,对样本值进行优化并开展计算,得到多个校正模型及对应的参考值-预测值图谱;基于校正模型的 R^2 和交叉验证均方根误差(RMSECV)

^[12]对模型可行性进行评价,最终筛选出质量较优的模型。预测模型的质量与 R^2 和RMSECV相关度较高。 R^2 越趋近于1,同时RMSECV值越小,表明模型的相关性越显著,其预测性能与可靠性越优异^[13]。

(2)校正模型验证。

将10批次验证试样的NIR导入建立的校正模型,获得验证试样相对黏度和相对分子量的预测值。使用验证试样相对黏度(或相对分子量)的预测值和参考值计算预测标准偏差(SEP)^[14]。SEP值越小,表明模型的预测能力越强^[13],若SEP值显著偏高,则提示模型可能存在过拟合风险,需重新优化建模参数或样本集。

2 结果与讨论

2.1 PA66的NIR

采集的82批次PA66样品的NIR谱图如图1所示。其中5 800~6 000 cm^{-1} 处的吸收峰为C—H伸缩振动的一级倍频,6 500~6 700 cm^{-1} 为N—H振动的一级倍频,5 150~5 300 cm^{-1} 为N—H与C=O合频振动,4 600~4 800 cm^{-1} 为C—H与N—H合频振动。尼龙的分子结构决定其相对分子量与相对黏度的数值与其端氨基N—H的浓度是具有相关性的,建立模型应选择包含4 600~6 700 cm^{-1} 的N—H出峰波段范围。

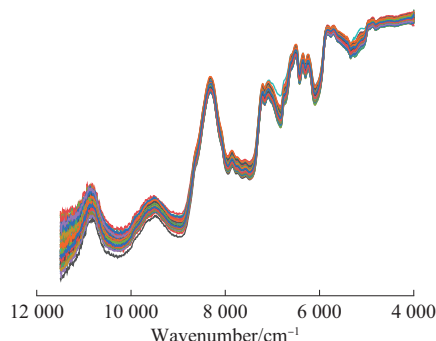


图1 PA66的NIR谱图

Fig. 1 NIR spectra of PA66

2.2 相对黏度预测模型的建立

2.2.1 校正模型建立参数的选择

使用S-Cal建模软件,基于82批次的PA66校正试样数据,通过改变建模参数建立多个校正模型。其中较优的校正模型参数组合见表1。由表1数据统计分析可知,模型9~11的 R^2 与RMSECV均较优,但考虑到变量数过大则引发过拟合,故可判断最佳参数为模型9对应参数:求导平滑窗参数13,模型变量数8,建模波段7 492~4 600 cm^{-1} ,预处理方法为一

表1 不同建模参数下PA66相对黏度校正模型

Tab. 1 Calibration models for relative viscosity of PA66 under different modeling parameters

No.	DS	NV	WR/cm ⁻¹	PM	R ²	RMSECV
1	9	7	7 492-4 600	SG+MC	0.914	0.323
2	13	7	7 492-4 600	SG+MC	0.918	0.315
3	15	7	7 492-4 600	SG+MC	0.918	0.314
4	17	7	7 492-4 600	SG+MC	0.917	0.317
5	13	3	7 492-5 450	SG+MC	0.730	0.572
6	13	4	7 492-5 450	SG+MC	0.769	0.529
7	13	5	7 492-5 450	SG+MC	0.882	0.377
8	13	6	9 403-5 450	SG+MC	0.907	0.336
9	13	8	7 492-4 600	SG+MC	0.923	0.305
10	13	9	7 492-4 600	SG+MC	0.923	0.305
11	13	10	7 492-4 600	SG+MC	0.923	0.305

Notes: DS is derivative smoothing parameter; NV is number of variables; WR is wavenumber range; PM is preprocessing method; SG+MC includes first-order Savitzky-Golay derivative and mean centering. Applies to following tables.

阶SG导数+均值中心化。

图2为表1模型9的预测值-参考值散点图,图3为表1模型9的预测残差-参考值图。图2和图3表明,有部分校正点偏离较大,参考值与预测值残差最大可达0.85,可剔除部分偏离较大的校正点,进一步优化模型。

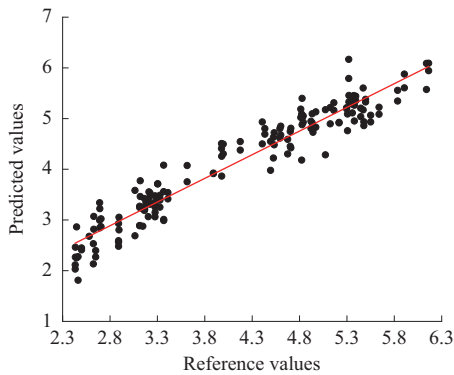


图2 表1模型9的预测值-参考值图

Fig. 2 Plot of predicted vs reference values for model 9 in table 1

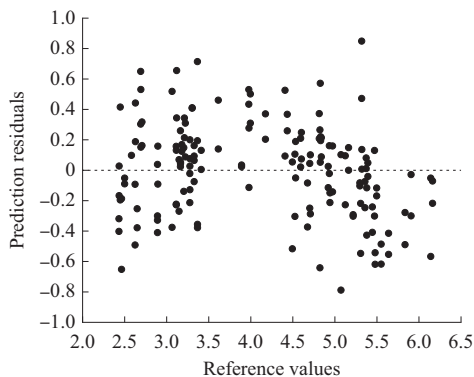


图3 表1模型9的预测残差-参考值图

Fig. 3 Plot of prediction residuals vs reference values for model 9 in table 1

2.2.2 校正模型优化与验证

将上述表1模型9进行优化,通过依次排除预测值与参考值有显著差异的校正点数,进一步得到多个预测模型,具体参数及性能指标见表2模型1'~6'。

表2 优化后PA66相对黏度校正模型

Tab. 2 Optimized PA66 relative viscosity calibration models

No.	WR/cm ⁻¹	PM	NOE	R ²	RMSECV	SEP
1'	7 492-4 600	SG+MC	0	0.923	0.305	0.268
2'	7 492-4 600	SG+MC	2	0.927	0.298	0.215
3'	7 492-4 600	SG+MC	6	0.938	0.273	0.212
4'	7 492-4 600	SG+MC	10	0.946	0.246	0.216
5'	7 492-4 600	SG+MC	12	0.948	0.246	0.203
6'	7 492-4 600	SG+MC	16	0.950	0.241	0.213

Notes: NOE is number of outliers excluded. Applies to following tables.

对表2模型1'~6'的性能进行验证,并计算得出SEP。表2中模型的SEP数据分析表明,随着排除校正点数从0逐步增加至16(优先排除预测值与参考值残差较大的校正点数),模型性能呈现系统性改善: R^2 从0.923提升至0.950, RMSECV从0.305降低至0.241,模型的SEP值呈先减小后增加趋势。综合评估各性能指标,表2模型5'既保证了预测精度,又有效控制了过拟合风险,可作为工业化应用的推荐模型。

PA66相对黏度较优模型的建模参数见表3,模型的预测值-参考值散点图如图4所示,模型的预测残差值-参考值图如图5所示,图4与图5表明该模型的线性以及预测残差值均优于未优化模型。

表3 PA66相对黏度校正模型参数

Tab. 3 Parameters of relative viscosity calibration model for PA66

DS	NV	WR/cm ⁻¹	PM	NOE	R ²	RMSECV
13	8	7 492-4 600	SG+MC	12	0.948	0.246

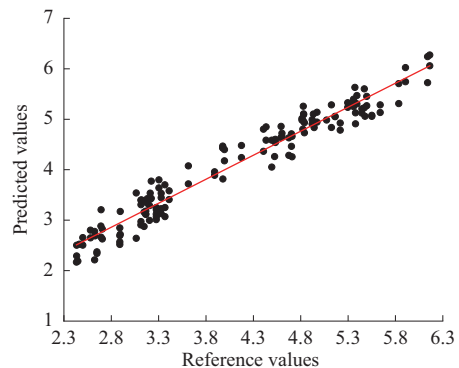


图4 PA66相对黏度校正模型的预测值-参考值图

Fig. 4 Plot of predicted vs reference values for PA66 relative viscosity calibration model

2.3 相对分子量预测模型的建立

尼龙的分子结构决定其相对分子量与相对黏

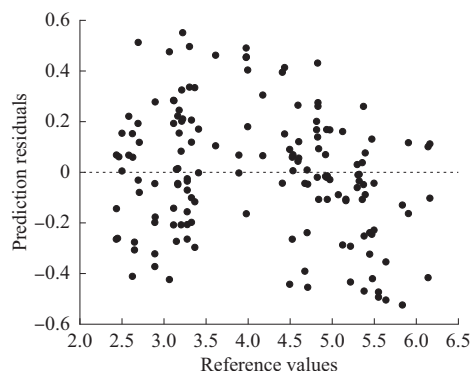


图5 PA66相对黏度校正模型的预测残差-参考值图

Fig. 5 Plot of prediction residuals vs reference values for PA66 relative viscosity calibration model

度通常呈正相关关系,相对分子量随着相对黏度增加而显著升高。故参考上述PA66相对黏度建模参数,使用82批次校正样品和10批次验证样建立了PA66相对分子量的预测模型,预测模型具体参数及性能指标见表4,可以看出数均分子量 M_n 与重均分子量 M_w 的预测模型性能指标较佳。

2.4 重复性

取未知PA66样品1、样品2进行NIR采集,每个样品测试5个平行样。使用模型分别预测样品5个平行样的相对黏度、数均分子量 M_n 、重均分子量

表4 PA66相对分子量预测模型参数及性能指标

Tab. 4 Parameters and performance metrics of PA66 relative molecular weight prediction models

No.	Metrics	WR/cm ⁻¹	R^2	RMSECV	SEP
1	M_n	7 492-4 600	0.948	4 058	3 834
2	M_w	7 492-4 240	0.952	8 859	6 390

Notes: M_n is number-average molecular weight; M_w is weight-average molecular weight. Applies to following tables.

M_w 。预测结果见表5,其相对标准偏差(RSD)均不超过8%,说明模型的预测重复性较好。

表5 NIR模型预测法重复性

Tab. 5 Repeatability of NIR model prediction testing method

Test	No.	1	2	3	4	5	RSD/%
η_r	1	3.10	3.17	3.10	3.28	3.28	2.84
η_r	2	3.64	3.64	3.56	3.78	3.41	3.75
M_n	1	33 124	34 923	34 905	36 232	37 974	5.08
M_n	2	37 643	43 034	43 122	41 069	37 134	7.12
M_w	1	76 160	78 965	74 781	78 507	84 026	4.51
M_w	2	85 755	95 255	97 432	89 388	87 678	5.50

Notes: η_r is relative viscosity. Applies to following tables.

2.5 未知试样的测定

表6为未知试样的预测值与参考值对比数据,相对黏度、相对分子量的预测值与参考值相对误差值均小于10%,说明NIR模型预测法具备较好的准确性。

表6 未知试样的测定结果预测值与参考值对比

Tab. 6 Comparison of predicted and reference values of determination results for unknown samples

No.	η_r			M_n			M_w		
	R	P	D	R	P	D	R	P	D
1	2.840	2.845	-0.005	29 807	28 480	1 327	69 914	64 821	5 093
2	3.054	3.294	-0.24	35 549	33 626	1 923	77 427	74 170	3 257
3	3.375	3.721	-0.346	41 390	45 290	-3 900	92 826	100 443	-7 617
4	4.448	4.572	-0.124	58 339	57 363	976	134 063	133 464	599
5	5.379	4.921	0.458	69 722	64 160	5 562	125 156	130 355	-5 199
6	5.107	5.332	-0.225	64 919	69 835	-4 916	136 927	148 712	-11 785
7	5.135	4.897	0.238	64 146	61 703	2 443	134 782	132 528	2 254
8	5.039	4.811	0.228	56 540	60 768	-4 228	131 139	132 842	-1 703
9	5.151	4.82	0.331	56 727	61 538	-4 811	130 911	140 455	-9 544
10	4.500	4.175	0.325	56 683	53 755	2 928	116 454	113 701	2 753

Notes: R is reference value; P is predicted value; D is residual between reference value and predicted value.

2.6 工厂生产应用

随着NIR光谱建模快速检测方法在实验室成功开发,与本实验室合作企业为了降低过渡物料的产生,企业质控部门引入了该快速检测方法,以替代传统耗时的检测方法。企业的部分批次样(共91批次样,相对黏度范围2.4~2.8)的相对黏度预测值与参考值数据如图6所示。由图6可知,75%以上样品的相对黏度预测值与参考值绝对偏差的绝对值小于0.05,95%以上样品的相对黏度预测值与参

考值绝对偏差绝对值小于0.1,该方法的准确性以及稳定性达到企业质控部门的要求,显著提升了PA66不同牌号切换的效率,进而大幅降低因牌号转产造成的过渡物料的产生。

3 结论

(1)基于NIR的快速检测方法,采用S-Cal建模软件高效快速地构建了PA66相对黏度以及相对分子量预测模型,通过改变建模参数以及排除异常校正点不断优化模型,得到SEP较低以及预测重复性

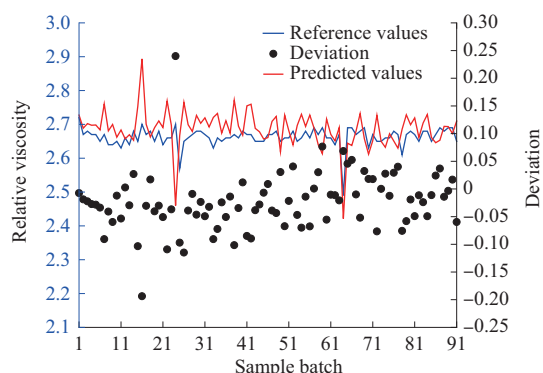


图6 企业批次样品相对黏度预测值与参考值趋势图

Fig. 6 Trend chart of predicted versus reference values of relative viscosity for industrial batch samples

较高(RSD<8%)的模型。使用NIR建模预测的快速检测方法具有较优的准确性与可靠性,可以满足一般工业生产质控及中控需求。

(2)将NIR建模预测的快速检测方法推广至工厂应用,95%以上样品的相对黏度预测值与参考值绝对偏差绝对值<0.1,取得了较好的使用效果,显著提升了检测效率。该方法具备高效性、快速性、低成本和环保安全性高等优点,具有较大的经济效益。

(3)随着该方法的成功开发,该类NIR建模快速检测方法可扩展应用至PA66、尼龙6、尼龙6T、MXD6等多个产品的相对黏度、相对分子量、水分含量、端氨基、端羧基等多个指标的快速检测。

参考文献

- [1] 郭选政,郭恒杰,谢县委.快速成型尼龙66分子量分布和结晶行为[J].塑料工业,2023,51(12):88-95.
GUO Xuanzheng, GUO Hengjie, XIE Xianwei. Study on molecular weight distribution and crystallization behavior of rapid prototyping nylon 66[J]. China Plastics Industry, 2023, 51(12):88-95.
- [2] STRIEGEL A M, YAU W W, KIRKLAND J J, et al. Modern size-exclusion liquid chromatography: Practice of gel permeation and gel filtration chromatography[M]. Hoboken: Wiley, 2009.
- [3] 陈瀑,杨健,褚小立,等.近五年我国近红外光谱分析技术的研究与应用进展[J].分析化学,2024,52(9):1 213-1 224.
CHEN Pu, YANG Jian, CHU Xiaoli, et al. Research and application progress of near infrared spectroscopy analytical technology in China in the past five years[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2024, 52(9):1 213-1 224.
- [4] 方旭,刘欣,李琪,等.面向油品参数快速计量的高精度傅里叶近红外光谱仪[J].计量学报,2024,45(1):103-111.
FANG Xu, LIU Xin, LI Qi, et al. High precision near infrared Fourier spectrometer for rapid measurement of oil parameters[J]. Acta Metrologica Sinica, 2024, 45(1):103-111.
- [5] 刘富光,何晓莉,吕芳,等.近红外光谱仪在白酒酒醅检测中的研

究与应用[J].酿酒科技,2024(9):43-47.

- LIU Fuguang, HE Xiaoli, LÜ Fang, et al. Research and application of near infrared spectrometer in the detection of baijiu fermented grains[J]. Liquor-Making Science & Technology, 2024(9):43-47.
- [6] 鞠兴荣,后其军,袁建,等.基于近红外光谱技术测定稻谷含水量研究[J].中国粮油学报,2015,30(11):120-124.
JU Xingrong, HOU Qijun, YUAN Jian, et al. Determination of moisture content of rice based on the near infrared spectroscopy[J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2015, 30(11): 120-124.
- [7] 罗晓霞,袁波,刘芳铭,等.硅酮胶中白油的鉴别及定量分析方法研究[J].塑料工业,2022,50(10):96-100, 112.
LUO Xiaoxia, YUAN Bo, LIU Fangming, et al. Identification and quantitative analysis of white oil in silicone adhesive[J]. China Plastics Industry, 2022, 50(10):96-100, 112.
- [8] 张姝,邓东浩,王宇遥,等.近红外光谱法测定聚乙烯醇的醇解度[J].合成纤维工业,2024,47(5):100-104.
ZHANG Shu, DENG Donghao, WANG Yuyao, et al. Determination of alcoholysis degree of polyvinyl alcohol by near-infrared spectroscopy[J]. China Synthetic Fiber Industry, 2024, 47(5): 100-104.
- [9] 黄武军,彭鑫鑫,谢京燕,等.近红外光谱技术在石油化工中的应用[J].广东化工,2024,51(18):66-68.
HUANG Wujun, PENG Xinxin, XIE Jingyan, et al. The application of near infrared spectroscopy technology in the petrochemical industry[J]. Guangdong Chemical Industry, 2024, 51(18):66-68.
- [10] 汪香君,陈晨,李军,等.近红外光谱技术在常用包装材料分类方法的研究与应用[J].包装工程,2024,45(17):180-188.
WANG Xiangjun, CHEN Chen, LI Jun, et al. Research and application of near-infrared spectroscopy technology in classification methods of commonly used packaging materials[J]. Packaging Engineering, 2024, 45(17):180-188.
- [11] 谢玉玉,陈志慧,侯雪玲,等.近红外光谱结合化学计量学快速测定阿里红饮片中齿孔酸含量[J].光谱学与光谱分析,2024,44(10):2 981-2 987.
XIE Yuyu, CHEN Zhihui, HOU Xueling, et al. A new method for determination of eburicoic acid in fomes officinalis Ames by NIR combined with PLS[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2024, 44(10):2 981-2 987.
- [12] 尹红果,李亚军,全海燕.近红外光谱分析技术在中药提取物生产中的应用[J].科技创新与生产力,2025,46(1):140-143.
YIN Hongguo, LI Yajun, QUAN Haiyan. Application of near-infrared spectroscopy analysis technology in the production of traditional Chinese medicine extracts[J]. Sci-Tech Innovation and Productivity, 2025, 46(1):140-143.
- [13] 李蓉,郝璐,袁洪福,等.一种近红外光谱定量分析软件预测性能评价方法[J].光谱学与光谱分析,2025,45(1):213-221.
LI Rong, HAO Lu, YUAN Hongfu, et al. An evaluation method of quantitative analysis software for near-infrared spectroscopy[J].

- Spectroscopy and Spectral Analysis, 2025, 45(1):213–221.
- [14] 全国仪器分析测试标准化技术委员会. 分子光谱多元校正定量分析通则: GB/T 29858–2013[S]. 北京: 中国标准出版社, 2014.
- Instrumental Analysis and Characterization. Standard guidelines for molecular spectroscopy multivariate calibration quantitative analysis: GB/T 29858–2013[S]. Beijing: Standards Press of China, 2009.
- [15] 周宇坤, 陈孝敬, 谢忠好, 等. 一种近红外光谱数据预处理组合优化策略[J]. 光谱学与光谱分析, 2025, 45(1):52–58.
- ZHOU Yukun, CHEN Xiaojing, XIE Zhonghao, et al. A combinatorial optimization strategy for near-infrared spectral data preprocessing[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2025, 45(1): 52–58.
- [16] 张亚春, 刘绍江. 近红外光谱在聚烯烃力学性能检测中的应用研究[J]. 塑料工业, 2025, 53(4):116–122.
- ZHANG Yachun, LIU Shaojiang. Research on the applications of near-infrared spectroscopy in the mechanical property detections of polyolefin[J]. China Plastics Industry, 2025, 53(4):116–122.

(上接第166页)

- [25] QIN Z F, WANG S H, ZHANG S H, et al. Cross-linked amidoxime porous resin for selective gallium separation in Bayer solutions: Reaction mechanism and kinetic study[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, 481. DOI:10.1016/j.cej.2023.148340.
- [26] LOU Z N, XIAO X, HUANG M N, et al. Acrylic acid-functionalized metal-organic frameworks for Sc(III) selective adsorption[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2019, 11(12): 11 772–11 781.
- [27] BOUBERKA Z, KHENIFI A, AIT MAHAMED H, et al. Adsorption of Supranol Yellow 4 GL from aqueous solution by surfactant-treated aluminum/chromium-intercalated bentonite[J]. Journal of Hazardous Materials, 2009, 162(1):378–385.
- [28] MPAYIPHELI N, MPUPA A, NOMNGONGO P N. Vortex-assisted dispersive molecularly imprinted polymer-based solid phase extraction of acetaminophen from water samples prior to HPLC-DAD determination[J]. Separations, 2021, 8(10). DOI: 10.3390/separations8100194.
- [29] HOLBREY J D. Stability and thermal decomposition of quaternary and protonated imidazolium nitrate and picrate salts[J]. ECS Proceedings Volumes, 2004, 2004-24(1):396–406.