

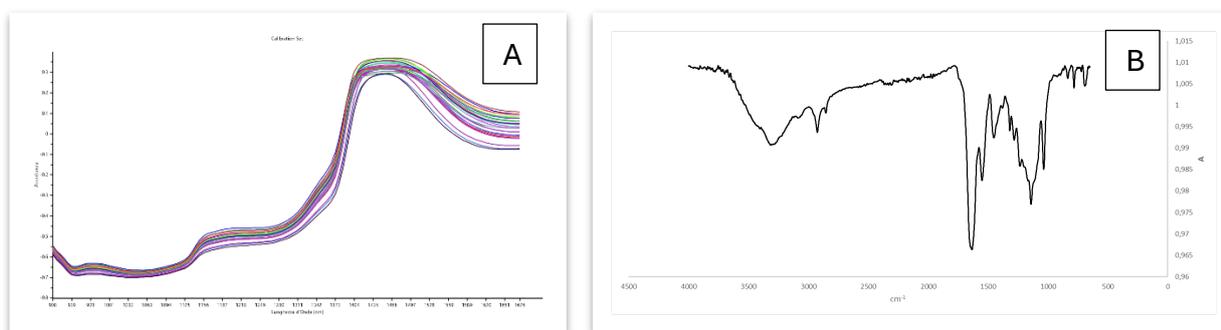
# Spettroscopia nel Vicino Infrarosso (NIR) e Chemiometria: Applicazioni nel Controllo di Qualità e nell'Industria Conciaria – Parte 1

## Spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR)

La cosiddetta radiazione ottica copre un'ampia varietà di lunghezze d'onda da 100 nm a 1 mm. Questa gamma è suddivisa in diverse regioni: le radiazioni ultraviolette (UV) vanno da 100 a 380 nm, le radiazioni visibili si estendono fino a 780 nm, e al di sopra di queste si trova radiazione infrarossa (IR). La stessa radiazione infrarossa è suddivisa in regioni: Vicino infrarosso (NIR) da 0.78  $\mu\text{m}$  a circa 2,5  $\mu\text{m}$ , medio infrarosso (MIR) da 2,5  $\mu\text{m}$  a circa 25  $\mu\text{m}$  e lontano infrarosso (LIR) fino a 1000  $\mu\text{m}$ . I segnali osservati negli spettri NIR sono strettamente correlati alle bande che corrispondono principalmente agli *overtone* (transizioni vibrazionali da primo stato fondamentale a secondo stato eccitato) e alle combinazioni di vibrazioni fondamentali (Blanco & Villarroya, 2002).

Gli spettri NIR non sono di facile interpretazione, presentano molto spesso caratteristiche molto simili tra loro e non consentono, tramite una semplice analisi visiva dei segnali, l'immediata individuazione dei gruppi funzionali, come avviene nella spettroscopia ATR-IR (figura 1). Per questo motivo, l'analisi degli spettri NIR è quasi sempre accompagnata da un'elaborazione chemiometrica dei dati.

Figura 1a spettri NIR in riflettanza diffusa; 1b Spettri ATR-IR con evidenti segnali di gruppi funzionali.



## Chemiometria

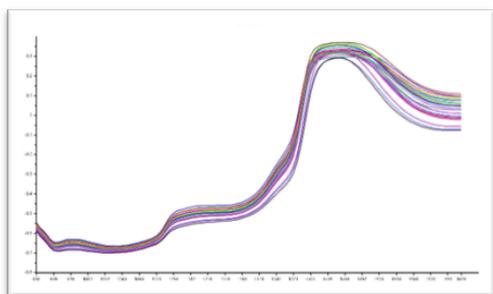
La chemiometria è una branca fondamentale della chimica moderna, in quanto consente di interpretare e analizzare una moltitudine di informazioni e dati chimici complessi con l'aiuto di metodi matematici e statistici efficienti. In questo momento storico in cui quantità di dati registrati dagli strumenti analitici aumentano sempre più, la chemiometria è una soluzione valida per estrarre informazioni preziose e costruire modelli intelligenti predittivi.

Si tratta di una disciplina della chimica utilizzata in molti ambiti come l'ambiente, l'industria farmaceutica, l'industria alimentare ma anche per l'analisi diretta di processi industriali e per il controllo qualità di prodotti. Migliorandone la base dei modelli statistici, la chemiometria aiuta a determinare la correlazione tra le variabili, identificando nei modelli i dati anomali e soprattutto semplificando la complessità dei dati analitici.

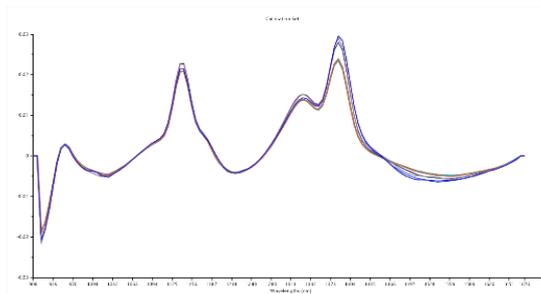
Uno degli strumenti più importanti della chemiometria è l'analisi delle componenti principali (**PCA**). La **PCA** è una tecnica di “semplificazione dei dati” utilizzata spesso nella statistica multivariata che consente di **ridurre le dimensioni dei dati** senza perdere informazioni. La PCA è particolarmente utile per l'analisi degli spettri IR (Infrarossi) e perfino NMR (Risonanza Magnetica Nucleare), in cui una grande quantità di dati registrati può rendere difficile l'interpretazione diretta. La PCA consente di evidenziare le strutture latenti (*pattern*) dando meno importanza alle informazioni ridondanti (ossia quelle presenti in tutti i campioni) e trasformando i dati originali in nuove variabili chiamate **componenti principali** ottenute come combinazione lineare delle variabili originali, che conservando la maggior parte della varianza.

La PCA e altri metodi chemiometrici, come la regressione ai minimi quadrati (Partial Least Squares, PLS) o le reti neurali artificiali, facilitano la creazione di modelli predittivi per la classificazione dei campioni, l'identificazione delle differenze tra i prodotti e persino la previsione delle proprietà chimiche e fisiche dai dati sperimentali. La chemiometria è anche di grande importanza nel controllo di qualità, in modo da poter sviluppare metodi rapidi e non distruttivi per il **monitoraggio dei processi** industriali e la verifica dell'autenticità dei prodotti.

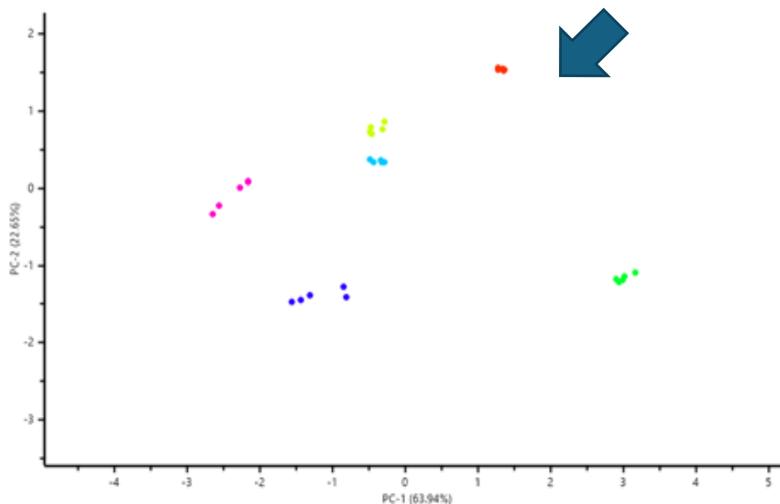
Figura 2 Esempio di analisi di spettri NIR in riflettanza diffusa, e successivo pretrattamento matematico per analisi PCA.



Acquisizione di spettri in riflettanza diffusa



Pretrattamento matematico degli spettri



Calcolo PCA - per evidenziare le differenze e le analogie tra i dati.

## BIBLIOGRAFIA

Blanco, M., & Villarroya, I. (2002). NIR spectroscopy: a rapid-response analytical tool. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 21(4), 240–250.  
[https://doi.org/10.1016/s0165-9936\(02\)00404-1](https://doi.org/10.1016/s0165-9936(02)00404-1)