

FT-IR・近赤外・ラマン製品オプション ソフトウェア・アクセサリのご紹介

マテリアルズ & ストラクチャーアナリシス事業本部

 The world leader in serving science



アジェンダ

1 FT-IR・近赤外・ラマン製品のご紹介

2 私がお勧めするアクセサリ・ソフトウェアのご紹介①

3 私がお勧めするアクセサリ・ソフトウェアのご紹介②

ThermoFisher
SCIENTIFIC



ベンチトップFT-IRのラインアップ

ThermoFisher
SCIENTIFIC



Thermo Scientific™ Nicolet™ iS5 / Summit



Thermo Scientific™ Nicolet™ iS20



Thermo Scientific™ Nicolet™ iS50

品質保証

品質に影響を与える汚染や欠陥を素早く確認する。

- サンプル可能な異物分析
- ルーチン分析
- 教育実習

問題解決

材料解析において、根本的な原因を特定する。

- ルーチン分析から研究開発
- 高分解能なガス分析
- 時間変化する長時間測定
- 顕微IRへのアップグレード
- TGA-IRアクセサリ対応

材料開発

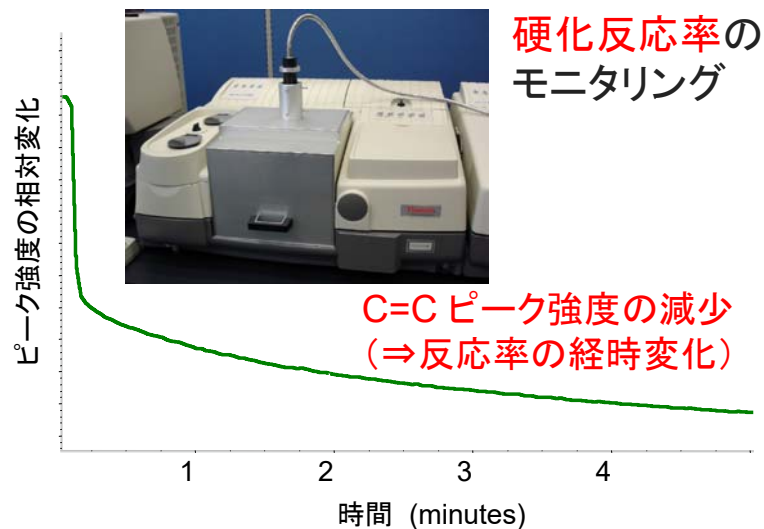
材料の化学的、物理的、構造的、元素特性を理解する。

- FT-IRの最高峰クラス
- 近赤外、中赤外、遠赤外をカバー
- ビルトインATRによる低波数分析
- 複数台の検出器でさまざまな研究
- UV硬化などの高速スキャン測定
- 多種類の測定モジュール

FT-IRの測定例 ～幅広いアプリケーションに対応～

ThermoFisher
SCIENTIFIC

- リアルタイムUV反応追跡
- 熱硬化・熱劣化測定
- MAIRS法
- FT-Raman
- TGA-IR
- GC-IR
- 遠赤外領域のATR測定



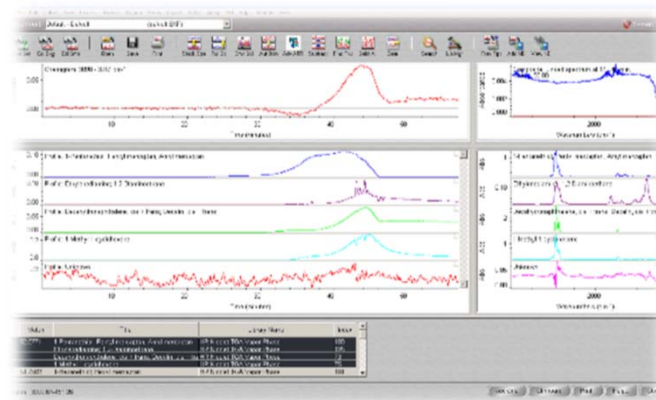
FT-Raman



GC-IR



TGA-IR



顕微FT-IRのラインアップ

ThermoFisher
SCIENTIFIC



Thermo Scientific™ Nicolet™ iN5 (+
Thermo Scientific™ Nicolet™ iS20)



Thermo Scientific™ Nicolet™ iN10
(+iZ10)



Thermo Scientific™ Nicolet™
Continuum™ (+iS50)

品質保証

品質に影響を与える汚染や欠陥を素早く確認する。

- 接眼レンズによる目視観察
- マニュアルステージの直観的操作
- 自動化を必要としないポイント測定
- ルーチン業務

問題解決

材料解析において、根本的な原因を特定する。

- 自動化されたインターフェース
- 面分析による赤外イメージの取得
- 多様な画像解析
- 赤外イメージから得る統計的な考察

材料開発

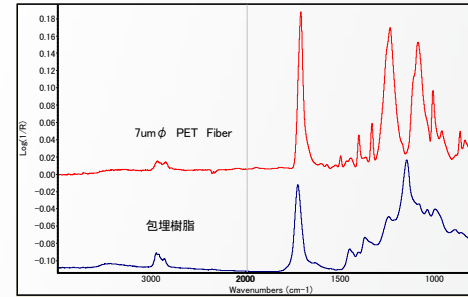
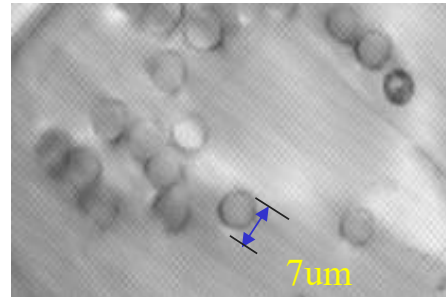
材料の化学的、物理的、構造的、元素特性を理解する。

- 偏光や微分干渉を用いた可視観察
- 迷光をカットするデュアルマスクング
- 用途に合わせた検出器の選択
- 加熱・冷却ステージを用いた微小部位での反応追跡

顕微FT-IRの測定例

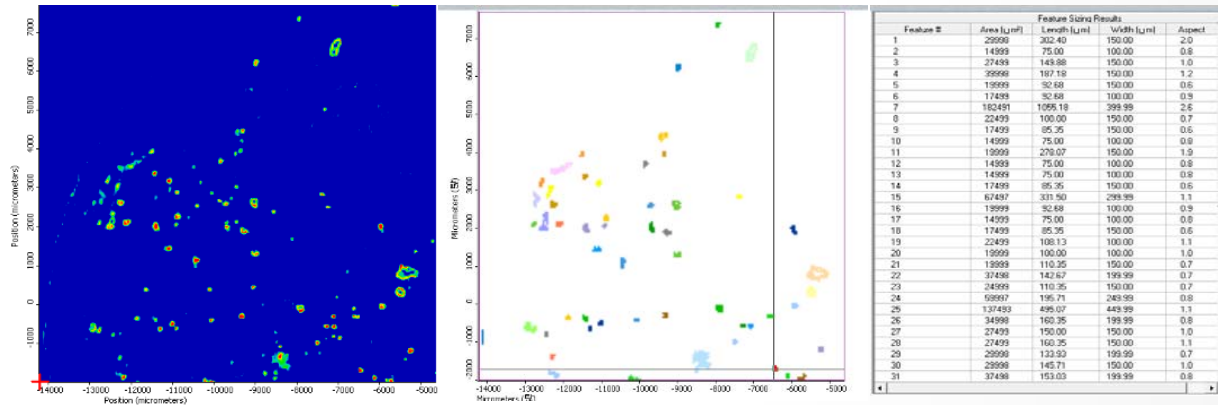
ThermoFisher
SCIENTIFIC

- 微小異物の測定
- マッピング・イメージング
- (多層フィルムなど)
- マイクロプラスチック分析

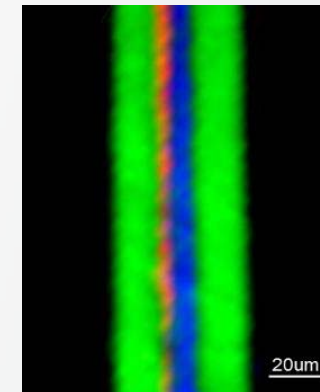


微小異物測定

包埋樹脂
PP PE 印刷層
PE PP
包埋樹脂



マイクロプラスチック分析



多層フィルムのイメージング測定

ラマン分光装置のラインアップ

ThermoFisher
SCIENTIFIC



Thermo Scientific™ DXR™3 Smart ラマン

品質保証

原料受入検査や製品出荷検査などバルクケミカル測定に最適なラマン装置。

- バイアル瓶、ビニール越しの測定可
- 混合物の平均データを取得
(最大5 mmx5 mm)
- オートキャリブレーション機能



Thermo Scientific™ DXR™3 顕微ラマン

品質保証・問題解決

微小領域(約1 μm)のポイント測定およびマッピング測定が可能なラマン装置。

- 共焦点機能により深さ方向測定可能
- FT-IRと同じThermo Scientific™ OMNIC™ ソフトウェア
- 豊富なライブラリ
- オートアライメント／キャリブレーション



Thermo Scientific™ DXR3™xi イメージングラマン

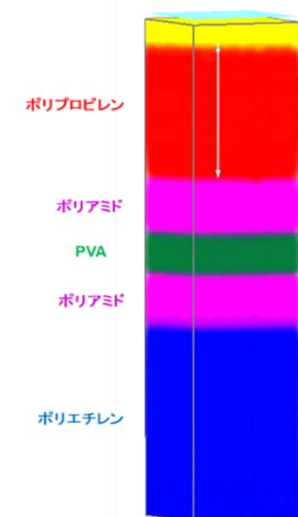
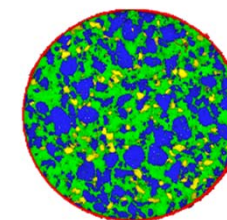
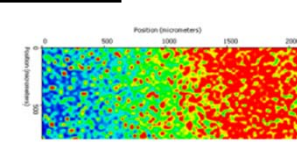
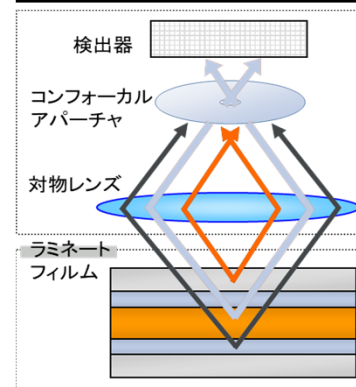
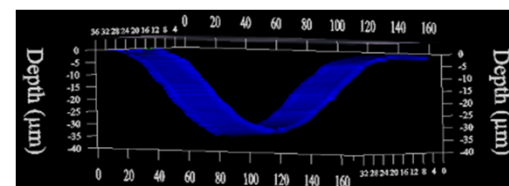
材料開発

高速・高感度イメージング。凹凸のあるサンプルも測定可能なラマン分光装置。

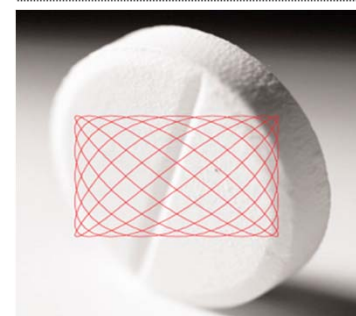
- 共焦点機能による3Dイメージング
- サンプルへのダメージを低減する積算イメージング
- オートアライメント／キャリブレーション

ラマンの測定例

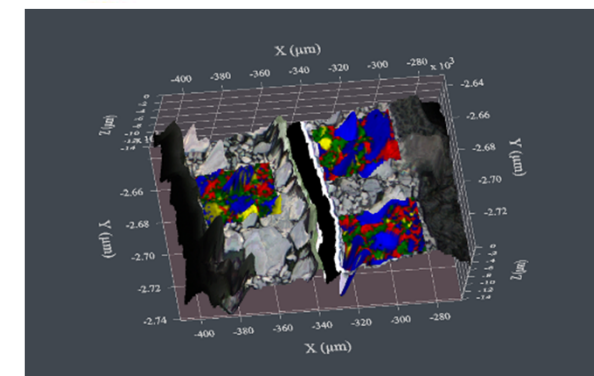
- **ポリマー**
ポリエチレン成形品の結晶性評価
多層フィルムの非破壊測定(各層や接着層の定性分析)
PTFE成形品の配向性評価
- **電池材料**
リチウムイオン電池電極材料の分散性
全固体電池材料の分散性
- **カーボン材料**
グラフェンの層数解析、グラファイト結晶性の評価、
ダイヤモンドライクカーボン(DLC)の状態
- **製薬(薬局方にラマンスペクトル測定が2019年に収載)**
錠剤イメージング
結晶多形の判別
貼付剤の各材料の深さ方向へのイメージング測定



積層ポリマーフィルムの構造解析



VDPS(最大5 mmx5 mm)



近赤外分光装置のラインアップ

ThermoFisher
SCIENTIFIC



Thermo Scientific™ Antaris™ II

透過・積分球・ファイバー・タブレット

堅牢なボディ・高感度・高安定性を兼ね備えた近赤外専用分光光度計。

- 測定モジュールを増設可能な設計
- 製薬向けバリデーション対応
- Audit Trail/Data Integrity対応
- 検量線作成ソフトウェア



Thermo Scientific™ Nicolet™ iS50+NIR
モジュール

透過・積分球・ファイバー

中赤外に加えて近赤外も同時測定が行えるFT-IRとNIRの複合モデル。

- FT-IRとNIR同様のソフトウェア操作
- 最適な光源・ビームスプリッター・検出器
- NIRモジュールによる専用の光学系



Thermo Scientific™ Nicolet™ iS5N

透過

コンパクト設計と簡易操作で手軽に近赤外測定を開始。

- ルーチン分析や簡易検測定に最適

NIRのアプリケーション例

各分野で使用されているアプリケーション例

製薬

- 原材料の受入検査(識別)
- タブレット(API)含有量の確認
- 乾燥プロセスのモニタリング
- 細胞培養の発酵確認
- 固体のブレンド均一性
- 凍結乾燥した材料の水分定量



食品・飲料・農業

- 食品中の脂肪・でんぷん・水分・タンパク質などの定量分析
- 食用油の分析
- 食品添加物の確認試験
- 製粉の確認試験
- バイオ燃料生産の最適化



インダストリ(ケミカル & ポリマー)

- バッチ中の反応モニタリング
- 潤滑油の品質確認
- 潤滑油中の添加剤モニタリング
- 水分、溶剤中の残留物
- 押出成形機からダイレクト確認
- ポリウレタン原料ポリオール



アプリケーションノート紹介

■ FT-NIRによる凍結乾燥製品の重要パラメーターの非破壊分析

thermo scientific
アプリケーションノート

FT-NIRによる凍結乾燥製品の重要パラメーターの非破壊分析

キーワード
Antaris II, FT-NIR, QA/QC, 凍結乾燥, 水分, トロンピン, 非破壊

概要
凍結乾燥装置は受入検査の際、容器を開封すると内容物が影響を受ける可能性があるため、QA/QC測定で難しいサンプルです。近赤外線分析は、ガラスやプラスチックなどの容器をスキャンして内部のサンプルを非破壊的に分析できるため、凍結乾燥材料に最適なソリューションとして広く採用されています。本アプリケーションノートでは、製造および品質管理で一般的に使用される凍結乾燥装置であるトロンピン®の凍結乾燥サンプル分析を行い、Thermo Scientific® Antaris II® FT-NIR 近赤外線アナライザーの性能を評価しました。凍結乾燥トロンピンの主要な安定性パラメーターは水分と力価であり、多量分析を用いて数回のサンプルから数分で予測することが可能です。また、凍結乾燥後の分析におけるその他の考慮事項についても説明します。

はじめに
凍結乾燥は、食品業界と製薬業界において一般的なプロセスであり、サンプルの劣化の必要をなくし、保存期間を劇的に延ばします。たとえば、通常数か月しか冷蔵保存できない製剤を凍結乾燥することによって、室温で数年安定して保存することが可能です。凍結乾燥は、解凍（凍結を解かず、水定置槽から乾燥に移行するプロセス）によってサンプル内の残留水分を除去することによって機能します。乾燥プロセスでサンプルから水を除去しようとするとき、サンプルが破損されることがあります。



Antaris II FT-NIR近赤外線アナライザー オートサンプリングアクセサリ付

乾燥のプロセスは、バイアルに注入されたさまざまなワームおよび糖蜜、有機化合物の溶液から始まります。バイアルに部分的に凍結して、溶液をガラス転移温度（T_g）または半結晶性化合物の場合は結晶温度以下に凍結します。ガラス転移温度は、その温度以下では材料が本質的に固体である温度のため、水の除去を効率的に進めることができます。次に圧力を下げ、凍結乾燥プロセスを一次乾燥段階から開始します。一次乾燥段階でバルク水分を除去した後、二次乾燥段階で残留水分（時には8重量%よりも多い場合がある）を除去します。ここでは、所望の乾燥度が達成されるまで、圧力をさらに下げながら温度をゆっくりと上げていきます。最後にバイアルに栓をしっかりと密封します。



ThermoFisher
SCIENTIFIC

凍結乾燥製品: <https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/MSD/Application-Notes/an-118-ftnir-lyophilized-materials-non-destructive-analysis-an118.pdf>

錠剤/ソフトジェル: <https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/MSD/Application-Notes/an-117-ftnir-solid-dosage-pharmaceuticals-an117.pdf>

■ 錠剤・ソフトジェル専用の分析ソリューション

thermo scientific
アプリケーションノート

錠剤・ソフトジェル専用の分析ソリューション

固形製剤の透過分析

キーワード
Antaris II, 錠剤/錠剤率, FT-NIR, 錠剤品, 錠剤, 透過率, 厚さ, 錠剤, 錠剤, ソフトジェル, QA/QC

概要
市場に流通している製薬品類の大部分は、錠剤と錠剤を目的とした錠剤やカプセルです。FT-NIRは製薬品類のFT-NIR分析は、これらの材料を測定するための強力な技術です。このアプリケーションノートでは、Thermo Scientific® Antaris II® FT-NIR アナライザーのソフトジェル透過モジュールとスタンダードタブレット透過モジュールに搭載された検出器の特性について説明します（錠剤、ソフトジェル錠剤、スタンダードタブレット検出器と錠剤）。錠剤とソフトジェルカプセルの基礎的スペクトルと透過スペクトルを説明します。

はじめに
製薬品の固形剤の分析は、通常、液体クロマトグラフィーを用いて行われますが、手間のかかる試料調製や装置の再利用が必要となり、製薬会社や代表的な製薬会社の製造に必要となるため、時間のかかる、非自動化的なHPLCアクセスに比べて、パッチ当たりのサンプル数を増やす、より簡単な技術に興味を持っています（時間のかかる非自動化的なHPLCアクセスではより困難になります）。これらの理由から、FT-NIR分析は魅力的な代替手段です。

錠剤の分析には基礎的透過法が用いられてきましたが、含有物の均一性に対する懸念があり、錠剤の成分をより正確に測定できる透過法のような非破壊的な方法を検討する必要が出てきました。

また、錠剤・錠剤、錠剤粉末、半錠剤成分などの錠剤は、錠剤に固定するのが難しいサンプルです。これら



図1. ソフトジェル錠剤と錠剤Antaris II FT-NIRアナライザー

の錠剤の中で、ソフトジェルカプセルは安全で費用対効果の高い錠剤です。ソフトジェルカプセルは、柔軟性があがり、飲み込みやすく、バイオアベイブルシティ向上上でできることから、ますます人気が高まっています。実際、カプセルの使用は、西暦のある錠剤を製造するための有効な方法として1800年代前半頃に始まりました。したがって、多くの製薬会社がカプセル化された錠剤が製造すると予想しました。

基礎的透過法では、ソフトジェルタイプの錠剤の正しい機能性が得られません。一方、FT-NIR透過法は、カプセルやソフトジェルのような非破壊的な透過の迅速で非破壊的な分析に理想的な答えを提供できます。

特徴
すべてのスペクトルを、ユニバーサルタブレットホルダーを使用して、Antaris II FT-NIRアナライザー（図1）を用いて、16 cm²の面積、30秒の測定時間で取得しました。透過測定には、ソフトジェル錠剤とスタンダードタブレット検出器を使用しています。基礎的透過測定は、内部の食塩水（塩化ナトリウム）と錠剤を保持して行いました。ビタミンE（錠剤）の測定には、光路長1 mmの光ファイバーディッププローブを用いました。



ThermoFisher
SCIENTIFIC

飲み薬として一般的な固形錠剤（固体）とカプセル錠剤（液体）について近赤外線アナライザーを用いて医薬品の有効成分を測定した事例をご紹介します

アプリケーションノート紹介

ThermoFisher
SCIENTIFIC

■ 近赤外分光装置を用いたポリオール中水酸基価の測定

thermo scientific
アプリケーションノート
No. 62908

近赤外分光分析装置 (FT-NIR) を用いたポリオール中水酸基価の測定

はじめに
ポリウレタンはセメントと類似した性質を有する材料として、車の内張りやビルフロアのグリッド、テニスクラケットなどの日用品に多く利用されています。ポリウレタンはポリオールとイソシアネートとの反応により形成されます。図1に示すように、反応物であるポリオールとイソシアネートの過剰二つ以上の官能基を持っています。*最終生成物であるポリウレタン樹脂はカルバミン酸塩もしくはウレタン結合を持っています。

図1. ポリウレタンの反応方程式

ポリウレタンの物理的特性は、製造過程における出発物質であるポリオール分子固有の特性を色付けせざるを得ない原因により阻害されています。ポリオール中の水酸基価（OH）の量がウレタン結合の量に直接影響を与え、最終生成物であるポリウレタンの物理的特性に大きな影響を与えます。従来では、ポリオール中の水酸基価は滴定法でポリオールと反応させる、水酸化カルシウム水溶液により測定されます。*滴定1グラムを中和するのに必要な水酸化カルシウムのミリグラム量（水酸基価）と呼ばれるASTM D4274-11に記述されています。この滴定化学手法は時間がかかり、いくつかの試薬を必要とします。ASTM D6342-12により、近年ではさまざまな物質の水酸基価の測定にフーリエ変換近赤外分光分析装置（FT-NIR）が利用されるようになってきています。*最新のFT-NIR分析装置を用いることで少量のサンプルで短時間の分析が可能です。このアプリケーションノートではThermo Scientific™ Nicolet™ iS50近赤外分光分析装置とID14熱電対透過アクセサリを組み合わせて使い、さまざまな水酸基価を持つポリブレンジグリコールの分析を行う方法をご紹介します。

測定条件
水酸基価の測定にはSigma-Aldrich™社より購入した六価のポリブレンジグリコールサンプルを用いました。この六価のサンプルにおける水酸基価は26~263 mg KOH/gです。各標準サンプル1 mLを8×40 mm、光径約6 mmのガラスバイアルに充填しました。このバイアルをID14熱電対透過アクセサリに設置し、より正確な結果を得るために、サンプルの温度変化が15°Cに40°Cに一定に保たれます。Nicolet iS50近赤外分光分析装置（図2）での測定を行う前に、サンプルをID14熱電対透過アクセサリに19時間静置して温度が安定な状態になるようにしました。装置構成は、CaF₂ビームスプリッター、タンダムスピン/ハロゲン光源、高感度InGaAs近赤外検出器です。1分以内の測定時間で、11,000から64,000 cm⁻¹領域のスペクトルを撮ることができ（スベクトル分解 8 cm⁻¹, 90回積算）。

ThermoFisher
SCIENTIFIC

ポリオール中の水酸化基化: <https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/MSD/Application-Notes/an-119-ftnir-determining-hydroxyl-value-an119.pdf>

セルロースエステルの識別: <https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/MSD/Application-Notes/an-107-ftir-ftnir-cellulosic-ester-analysis-an107.pdf>

■ FT-NIRを用いたセルロースエステルの識別分析

thermo scientific
APPLICATION NOTE
FT-NIRを用いたセルロースエステルの識別分析: フィールドからラボへのメソッド移行

キーワード
Nicolet iS50 NIRモジュール、FT-NIR 近赤外分光法、ドラッグデリバリー、糖酸セルロース

はじめに
近赤外（NIR）分光法は、食品または製薬業界における高品質に制御されたプロセス環境のための一般的な分析ツールです。電磁スペクトルの近赤外領域は、ガラス製の容器、窓、ファイバーを容易に透過するため、試料を採取したり、実験室に持ち込んで分析したりする必要がなく、プロセスの流れの中で直接物質を分析する目的に理想的です。一般に、光ファイバーケーブルは、プロセス内の物質をリアルタイムで連続モニタリングするために利用されます。さらに、サンプルをガラスバイアルごと分析できるため、分析者を材料に、またはサンプルを環境に暴露することがありません。

NIR分析メソッドは、しばしば、研究用の装置を使用して、管理されたラボ内で開発・テストされます。信頼性を備えた装置と制御された環境は、理想的な一連の標準物質からスペクトルを収集し、最良の分析とメソッドのパラメータを開発するのに最適です。いったんこのメソッドが確立されると、次に真実に設計されたNIR装置を用いて、生産プロセス環境におけるルーチン分析に適用されます。場合によっては、信頼性（繰り返し）となったメソッドが現場で失敗することがあり、実験室でそのメソッドを再検証する必要があります。これらの場合、試験サンプルは、方法分析およびトラブルシューティングの一部として中央の研究所に送られます。この評価、修正プロセスについても、使用中の生産現場のメソッドを分析ラボの装置へ移行する必要があります。そのためには生産プロセスとラボの機器の装置パフォーマンスが互換性なく一致する必要があります。

Thermo Scientific Nicolet iS50 FT-IR 分光光度計とiS50 NIRモジュール

Thermo Scientific Antaris II FT-NIR 分光光度計

ここでは、分析、評価および修正の目的のために、プロセス機器Thermo Scientific™ Antaris™ NIR 近赤外アナライザから、実験機器Thermo Scientific™ Nicolet™ iS50 FT-IR分光光度計（図4および図5）へのメソッド移行の同等性を証明します。この「逆移行」（生産現場からラボへ）の効率性を証明するために、一連のセルロースアセテートエステルモデル化合物として使用しました。

ThermoFisher
SCIENTIFIC

さまざまなセルロースエステルの識別と、Antaris II でのメソッドをiS50に移行した検証作業のご紹介（製造現場とラボによる双方向での問題解決）



アジェンダ

1 FT-IR・近赤外・ラマン製品のご紹介

2 私がお勧めするアクセサリ・ソフトウェアのご紹介①

3 私がお勧めするアクセサリ・ソフトウェアのご紹介②

ThermoFisher
SCIENTIFIC

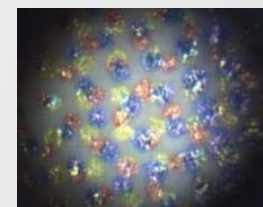


私がお勧めするアクセサリ・ソフトウェアのご紹介①

外部反射アクセサリ『Thermo Scientific™ ConservatIR™』



- 測定方法: 反射／拡散反射による非破壊測定! (ダイヤモンドATRオプションあり)
- 測定モード: 反射およびATR
- サンプル表面の可視映像取得可能(USB出力)
- 光学系アーム可動角: $-5 \sim 95^\circ$ (赤外光入射角は常に 45°)
- 赤外光スポット径(直径): 反射測定 1.25 mm (ATRのスポットサイズは0.5 mm)
- スペクトル領域: 中赤外～遠赤外領域(無機化合物のサンプルの測定にも非常に有効)
※FT-IR本体光学系仕様に依存
- サンプルを近づけるだけの簡単測定! 誰でも容易に使用可能!
- OMNICおよびThermo Scientific™ OMNIC Paradigmソフトウェアで精度の高いKramers-Kronig (K-K) 変換



ConservatIRの可視観察
で得られたカタログ表面の
可視画像

測定例①: 自動車タイヤ表面の付着物の分析

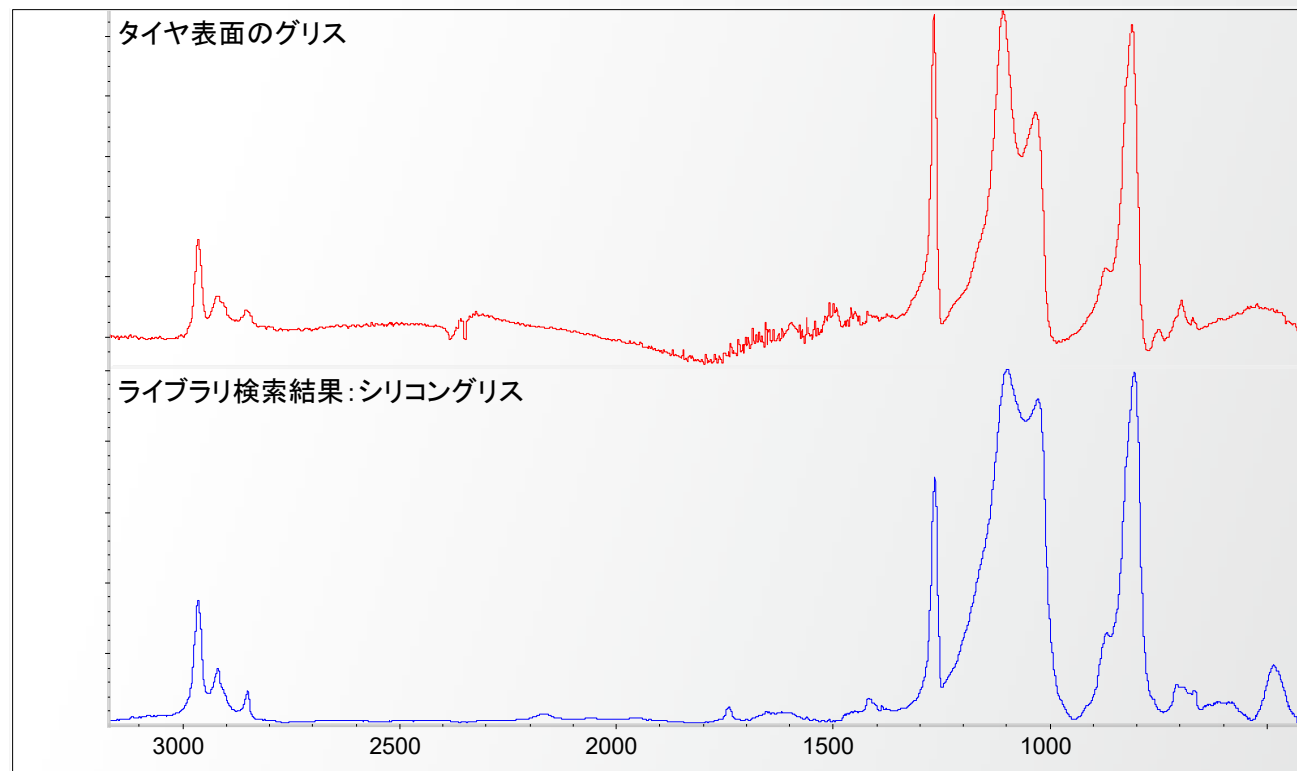


自動車タイヤの表面に付着しているコンタミネーション



ConservatIRのアームを0度付近にセットして測定

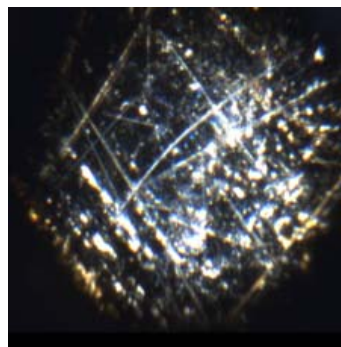
測定部を切り取ることができない、サイズの的にラボに持ち運べないサンプルの測定。
小型IRを用いて、現場でConservatIRを近づけるだけでダイレクトに測定可能。



測定例②: 缶の表面のコーティング膜の分析

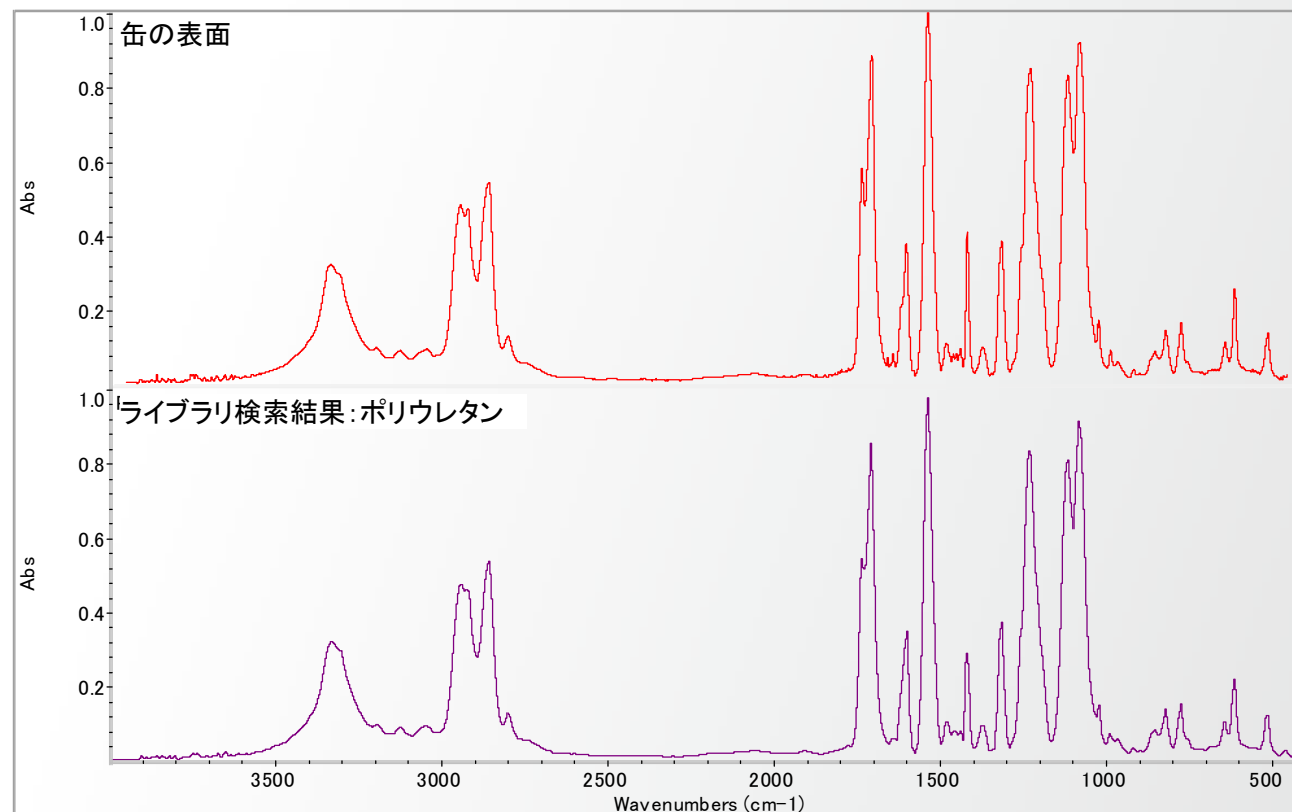


ConservatIR アームヘッドにATRアッセンブリを装着、
サンプルをダイヤモンドクリスタルに接触させている様子



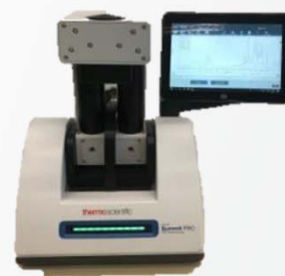
可視観察画像(PCでキャプチャ)

サンプリングが困難な金属製の缶の表面を測定。ConservatIRに装備できる
ダイヤモンドATRを用いて、表面のウレタンコーティング層を検出した。

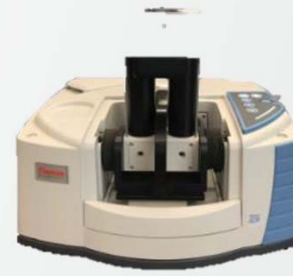


まとめ

- ConservatIRは、「分解できない」「外せない」「動かせない」「希少・貴重品」「カッティング不可」などサンプリングができない対象物に対して高感度で測定可能
(例)FT-IRサンプル室に収まらない大きなサンプル(自動車ボディや部品、建材)などに付着したコンタミネーションやコーティング成分の解析、缶表面、美術品の真贋評価
- 搭載可能モデル
小型(Summit、iS5)、ミドルレンジ(iS20)、リサーチグレード(iS50)、旧型モデルなど、すべてのサーモフィッシャーサイエンティフィック社製FT-IR
- 当社ラボ(リモート含む)や持込デモで実機を使った測定の様子をご覧ください。



Nicolet Summit/ConservatIR



Nicolet iS20/ConservatIR



Nicolet iS50/ConservatIR

参考資料

ConservatIRリーフレット

thermoscientific

DATA SHEET

Thermo Scientific ConservatIR FTIR
External Reflection Accessory

Convenient flexibility to measure large samples

Easily perform qualitative spectral analysis on large objects using the Thermo Scientific® ConservatIR® FTIR External Reflection Accessory. Investigate paints, pigments, and other component materials of art objects using the accessory with a Thermo Scientific® FTIR Spectrometer. Verify the authenticity of art objects before they go to auction or confirm the materials needed for restoration and conservation. Designed for art conservators, this accessory can also analyze a variety of large objects such as automotive parts, toys, and fixtures.

ConservatIR FTIR external reflection accessory offers:

- **Easy positioning** – opto-mechanical arm measures samples oriented in front, below or above the spectrometer sample compartment
- **Precise visual orientation** – accessory arm contains an integrated camera that provides a magnified view and image capture of the sampled spot
- **Multiple measurement modes** – analyze small or large samples with a specular/diffuse reflection sampling head or use an optional diamond ATR sampling head

ConservatIR FTIR External Reflection Accessory Specifications

Detector Type	Uses detector on board the Nicolet FTIR spectrometers
Dimensions (mm)	533 (H) x 622 (W) x 653 (D)
Voltage	100 - 240 VAC 47-63 Hz 3.2 A
Certifications/Compliance	CE, ETL; Manufactured in an ISO 9001:2000 certified facility
For use with	Thermo Scientific® Nicolet® iS5 and Nicolet iS10 Spectrometers
ATR Crystal (optional)	Diamond
Reflection Mode Spot Size	~1.25 mm in diameter
ATR Mode Spot Size	~0.5 mm in diameter

ConservatIR accessory in various positions of the Nicolet iS5 FTIR sample compartment.

ThermoFisher
SCIENTIFIC

ConservatIR 外部反射アクセサリ

<https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/MSD/Datasheets/DS52332-conservatir-ftir-reflection-accessory.pdf>



※日本語リーフレットも準備しておりますのでお問い合わせください。

アジェンダ

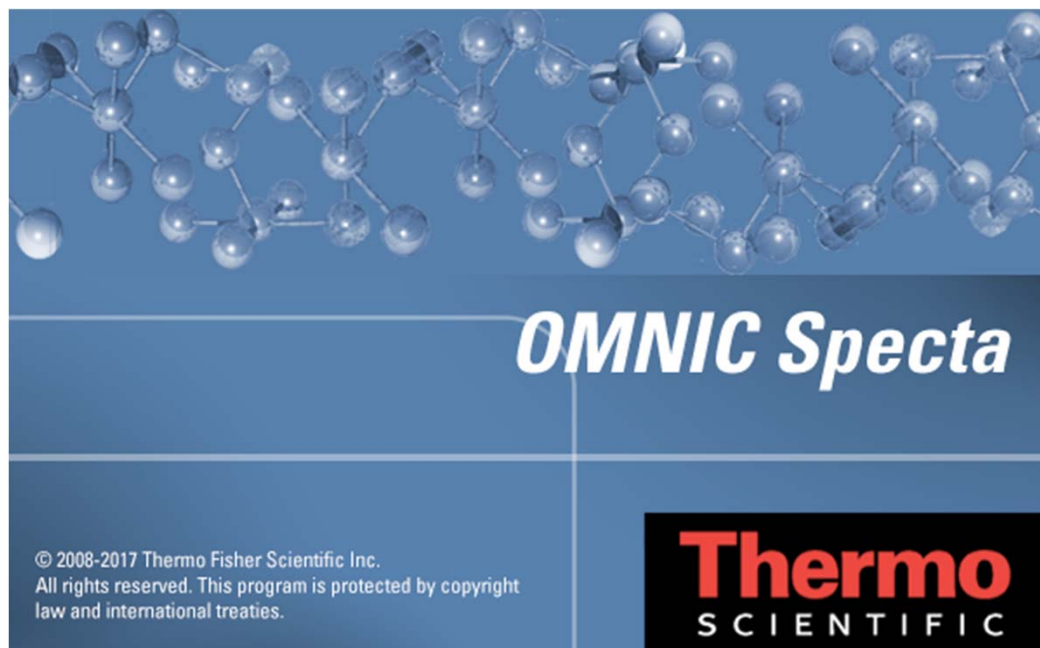
- 1 FT-IR・近赤外・ラマン製品のご紹介
- 2 私がお勧めするアクセサリ・ソフトウェアのご紹介①
- 3 私がお勧めするアクセサリ・ソフトウェアのご紹介②

ThermoFisher
SCIENTIFIC



私がお勧めするアクセサリ・ソフトウェアのご紹介②

Thermo Scientific™ OMNIC™ Specta ソフトウェア



充実したサーチ機能

- ◆ スペクトルサーチ: 一般的な単一成分の検索機能
- ◆ 多成分サーチ: 混合物のスペクトル検索機能
- ◆ 不純物サーチ: 既知成分以外のスペクトル検索機能

充実したデータ処理機能

- ◆ 差スペクトル、ベースライン補正、スムージング、ピーク検出、ATR補正、ブランク、正規化、大気補正などのスペクトル処理が可能

便利なライブラリ スペクトルの検索

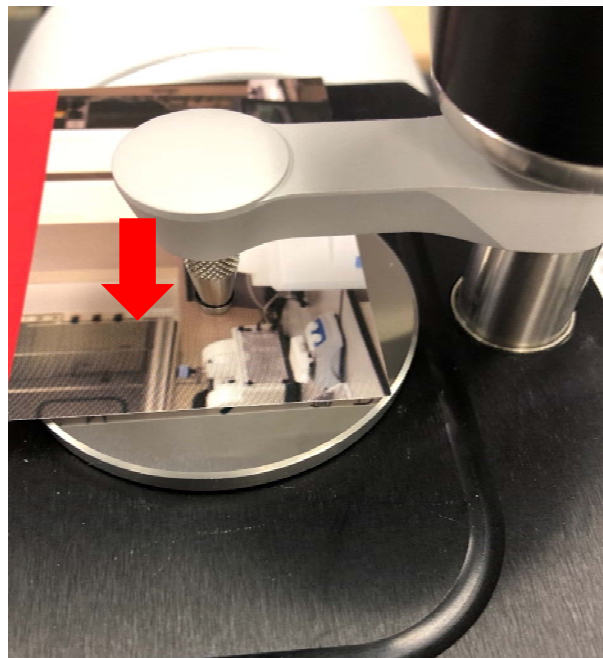
- ◆ 成分名をテキストサーチして、赤外スペクトルを表示可能

事例①: カタログ表面コーティング膜の確認

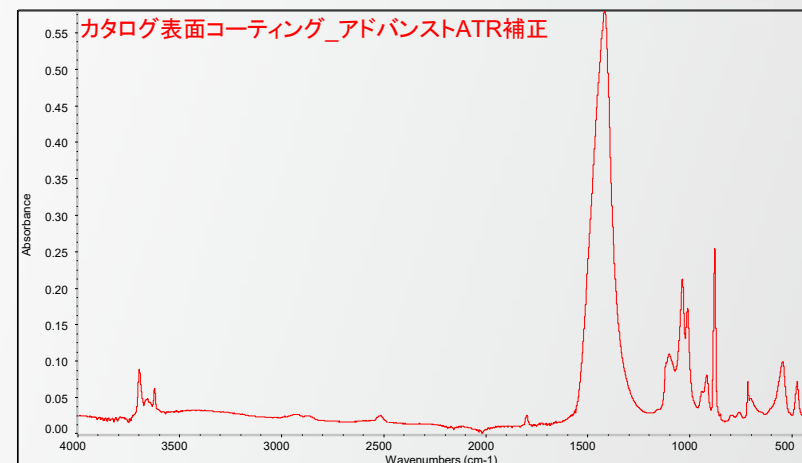
FT-IRを用いてカタログ表面をATRで測定



カタログ表面にコーティングされた成分を確認する。



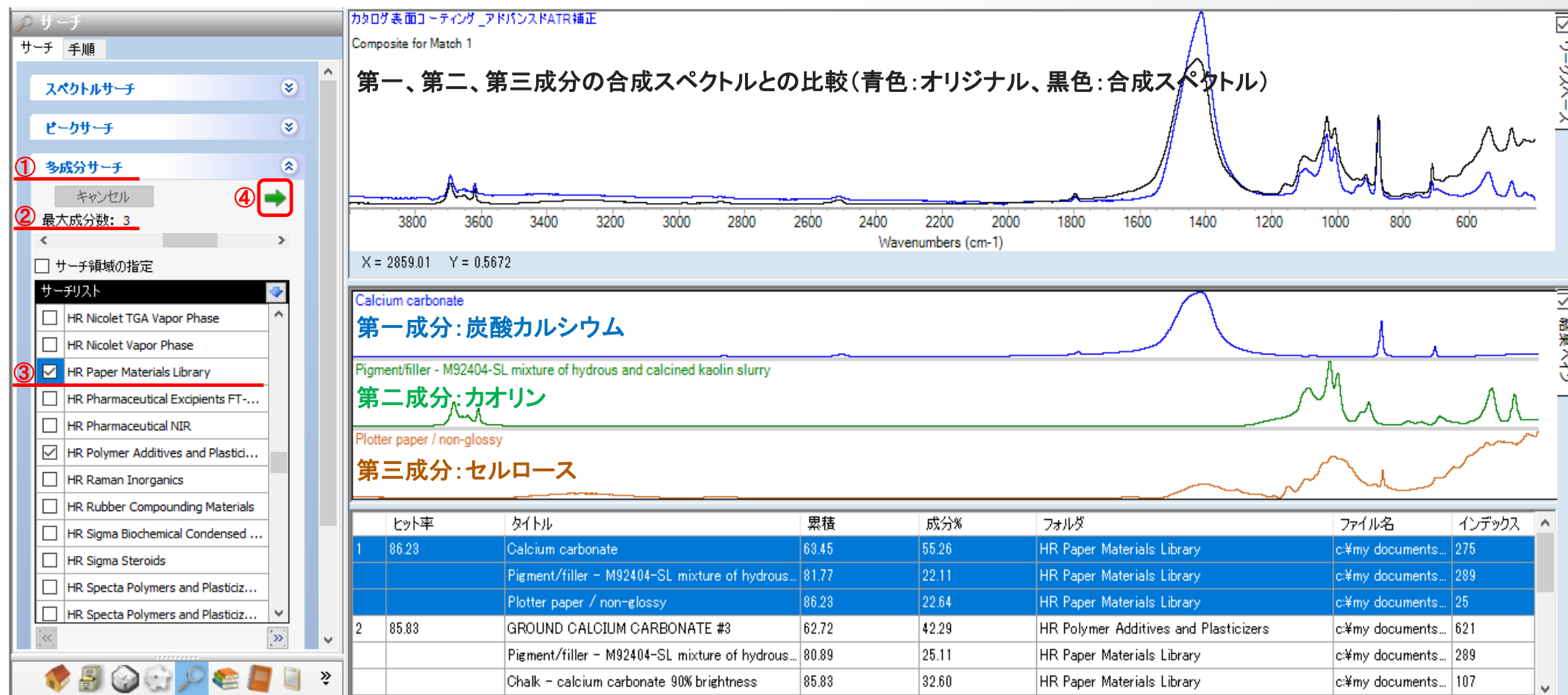
カタログ表面を下に向けてATRクリスタルと接触させ、プレッシャーデバイスで押さえる。



Nicolet iS5 + ダイヤモンド ATRアクセサリを用いてカタログ表面コーティング膜の赤外スペクトルを取得。

事例①:カタログ表面コーティング膜の確認

OMNIC Spectraで多成分サーチを実施した事例

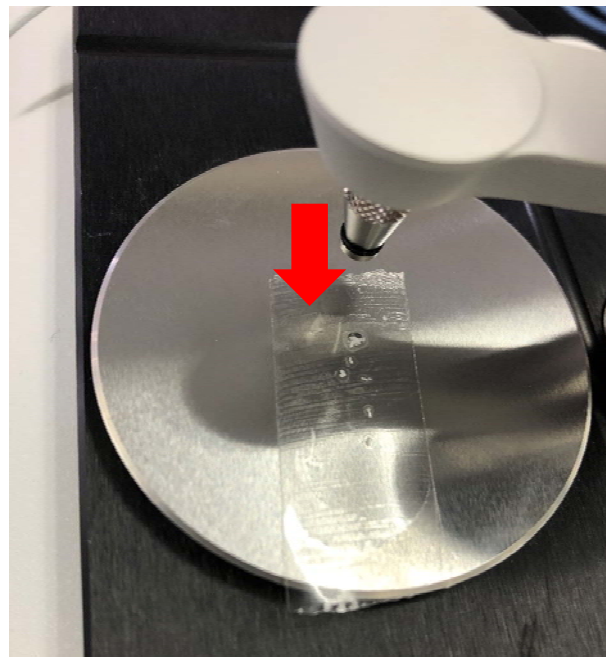


事例②: セロハンテープで捕集した白色物の確認

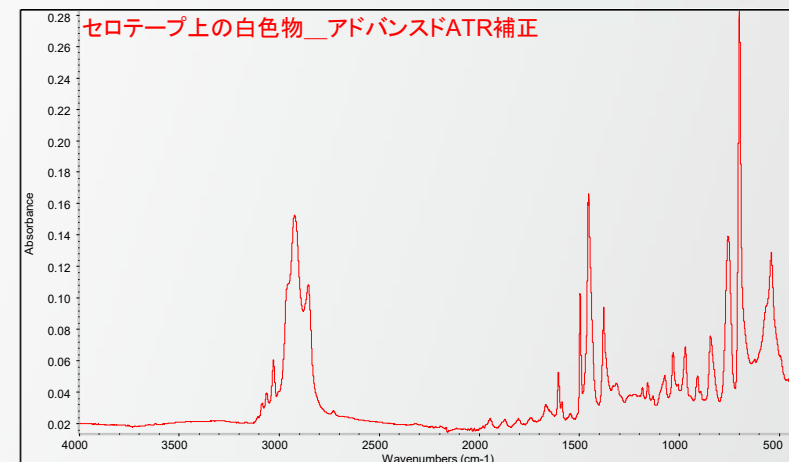
FT-IRを用いてセロハンテープで捕集した白色物をATRで測定



セロハンテープで捕集した1 mm程度の白色物。



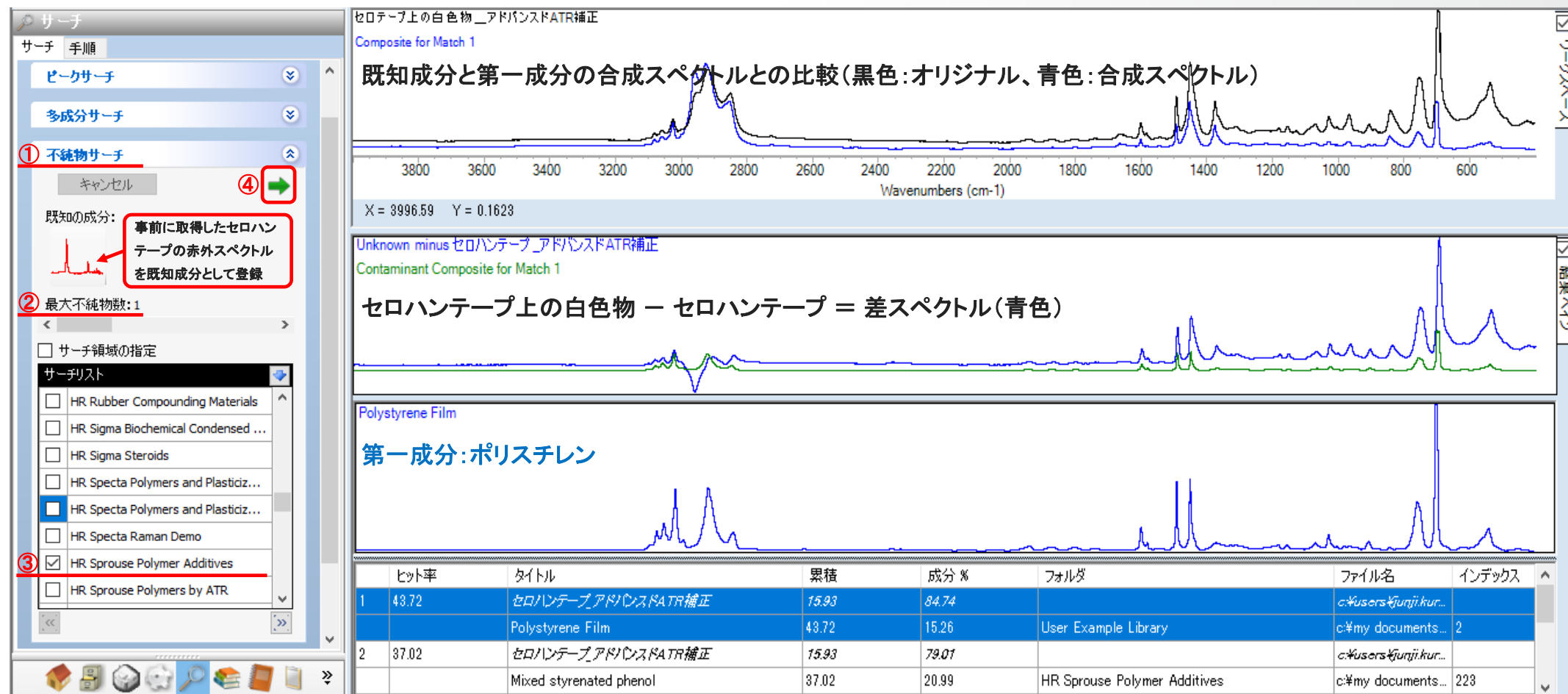
セロハンテープの接着面を下に向け、白色物とATRクリスタルの位置を合わせ、プレッシャーデバイスで押さえる。



Nicolet iS5 + ダイヤモンド ATRアクセサリを用いてセロハンテープ上白色物の赤外スペクトルを取得。

事例②: セロハンテープで捕集した白色物の確認

OMNIC Spectaで不純物サーチを実施した事例



アプリケーションノートの紹介

OMNIC Spectaによる混合物のライブラリサーチ –多成分サーチ、不純物サーチ–

<https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/MSD/Application-Notes/an-086-ftir-mixture-library-search-an086-ja.pdf>



thermoscientific

Application Note

OMNIC Spectaによる混合物のライブラリサーチ –多成分サーチ、不純物サーチ–

はじめに

材料の定性分析は、FT-IRにおけるもっとも一般的なアプリケーションの一つです。単純（単一）な材料であれば、ATR測定とスペクトル検索を用いることにより数十秒で定性が可能です。しかしながら材料は、通常は一つのサンプルに複数の成分が含まれた、いわゆる混合物（添加剤、汚染物質等）であるものがほとんどであり、これらを各々定性する必要があります。

通常、混合物の定性はスペクトルの解釈および多段階の定性手順の構築が必要で、これを行うためには多くの経験と知識を要します。混合物の定性では、まず適切な波数範囲を選択して「ライブラリ検索」を行い、次に混合物のスペクトルと得られた検索結果のスペクトルで「引き算」を行い（可変の係数kを用いて、検索結果のスペクトルが元のスペクトルに残らないように調整します）、得られた差スペクトルについて再びライブラリ検索を行います。これらの手順を繰り返し行うことで、混合物の第二、第三の成分が得られます。

この手順は混合物の定性手段として有効ですが、いくつか問題点があります。一つ目は、分析者が最初の「検索」から得られた結果の中から適切なスペクトルを選択する必要があることです。混合物の定性では、実際にサンプルスペクトルに含まれる正しいスペクトルが検索結果の最上位に残れないことがあるため、検索結果の中から混合物に含まれる物質を選択しなければなりません。

二つ目は、「引き算」を行う際に使用する係数kの決定に、分析者の判断が要求されることです。スペクトルの引き算において、最初の検索から得られたライブラリのスペクトルを混合物のスペクトルから十分に引き除けていない、またはその逆にスペクトルを引き過ぎた場合、その後の差スペクトルのライブラリ検索において有用な情報が得られなくなる可能性があります。混合物の定性では「検索」「引き算」を繰り返し行うため、さらなる歪みが生じる可能性もあります。

ThermoFisher

SCIENTIFIC

各種アプリケーションノート ダウンロード: <https://www.thermofisher.com/jp/ja/home/technical-resources/application-notes.html?cat=raman&tab=pro>

25 診断用には使用いただけません

Thank you

診断用には使用いただけません。

© 2021 Thermo Fisher Scientific Inc. All rights reserved.

All trademarks are the property of Thermo Fisher Scientific and its subsidiaries unless otherwise specified.

実際の価格は、弊社販売代理店までお問い合わせください。

価格、製品の仕様、外観、記載内容は予告なしに変更する場合がありますのであらかじめご了承ください。

標準販売条件はこちらをご覧ください。 thermofisher.com/jp-tc

