



## Application Note AN-RS-013

# 容器内容物の同定

## わかりやすいワークフローによる簡単なラマン分析

危険な状況において、現場での未知試料の同定は重要なカギになります。迅速に、しかし慎重に、その対象物質についてできる限り多くの情報を得ることか不可欠です。未知の試料を扱うときには安全が最優先されます。その物質の有毒性、レーザー光線による発火性、環境への危険性等に配慮する必要があります。専門家からの情報を迅速に得られればいいですか、通常現場にはそのような専門家はいません。

迅速性と安全性の両面から、容器越しに内部の未知試料を同定できれば大きなメリットとなります。ハントヘルトラマン分析計MIRA DSとインテリシエントユニバーサルタッチメント(iUA)を組み合わせる

と、ワンタッチでコンテンツID機能の利用が可能になります。コンテンツIDは容器の内容物と容器の素材を区別して同定する機能です。iUAかMIRA DSに装着することでコンテンツIDの測定フローラムが自動的に起動し、簡単なワークフロータイプの操作モードになります。このアプリケーションノートでは、容器内容物を同定するための Mira DS と iUA の使用について、カイト付きワークフロー、コンテンツ ID のスケルトンおよび同定結果の例を含めて説明します。iUAとMira DSを使用すれば、サンフルに触れることなく、数秒で安全な結果が得られます。

## iUA (インテリジェント・ユニバーサルアタッチメント)

3つの焦点距離を識別できるチップを搭載したMira DSでのサンフリンクを容易にするユニバーサルアタッチメントです。 厚い瓶やホトル、薄い袋、容器の表面といったどんな焦点距離でも、ユーザーは安全かつ簡単に未知の試料を測定することができます。

表面 ● 焦点距離 < 1 mm  
ハック ●● 焦点距離 ~ 5 mm 袋や薄いホトルの外側から測定  
ホトル ●●● 焦点距離 ~ 8 mm 厚いプラスチックやカラスのホトルの外側から測定

### 内容物や容器の材質をわかりやすく表示

iUAはチップのテサインを最適化することで機能を充実させました。iUAを回転させると、MIRA DSかその焦点ホシションと最適な測定方法を認識し、簡単に試料の同定分析を行います(右図例)。未知の試料にiUA先端を押し当て、「Acquire」をタッチすれば、システムが測定を開始し、数秒で同定結果を表示します。

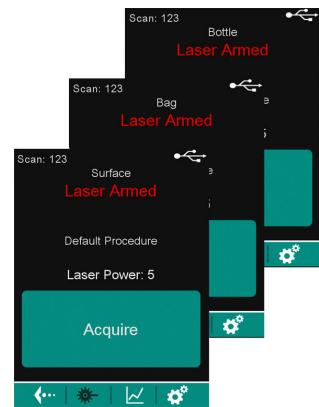


図1. iUA 3ポジションのスクリーン表示例

iUAをMira DSに装着すると、自動的にコンテンツIDの操作手順(OP)が機器上で有効になり、「Change Procedure(手順変更)」をタッチしてコンテンツIDの測定フロクラムを選択することができます。

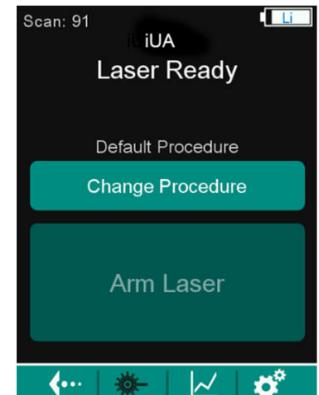


図2. MIRA DS iUA ホームスクリーン

コンテンツIDの操作手順(OP)を指定すると、Mira DSは非常にシンプルな2段階のワークフローでユーザーをガイドします(右の例)。iUAをMIRAにセットして、容器の外側から内容物にもレーザーが当たるよう1回目の測定を行います。2回目の測定ではiUAを内容物よりも上の容器にセットします。Mira DSは、容器とその内容物の両方を数秒のうちに自動的に最適化、平均化、照合を行い、結果を表示します(図4の例)。

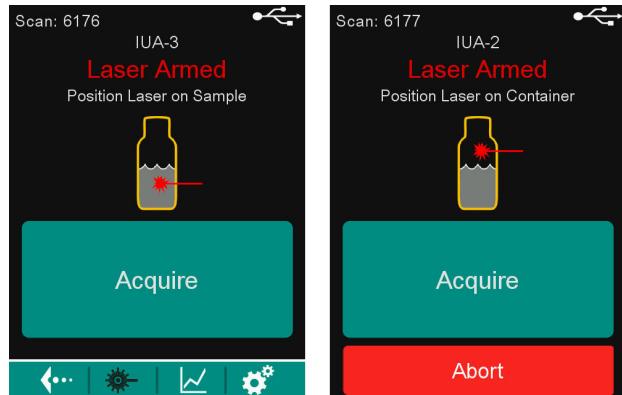


図3. コンテンツIDワークフロー

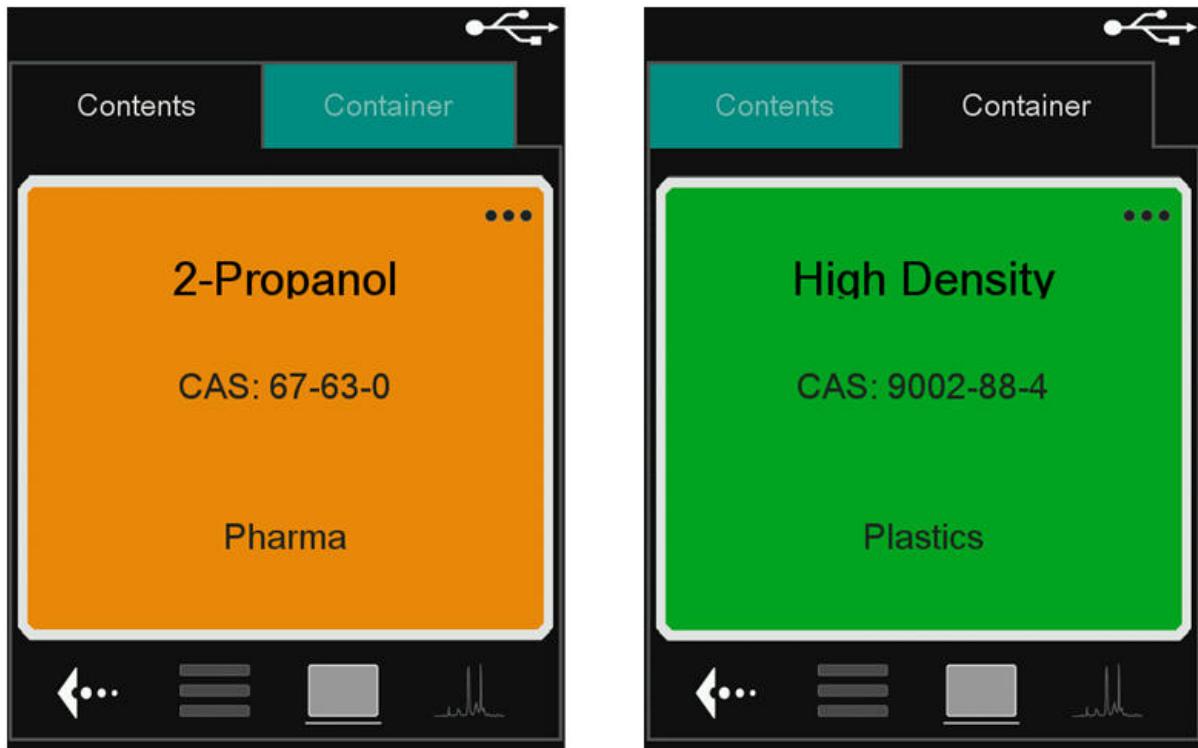


図4. コンテンツID結果表示

## コンテンツIDの例

スマート測定、iUA、Mira DSの独自アルコリズムの強力な組み合わせで価値ある結果が得られます。

- スルーハリアテスト
- 混合物の確実な分析
- 汚染物質の存在下での主要成分の正確な同定

以下の最初の例は、茶色のプラスチックホトルを通して、有効成分を含む約30%w/vのクリセリン(クリセロール)を主成分とする液体混合物(咳止めシロップ)の内容物を確認する例です。

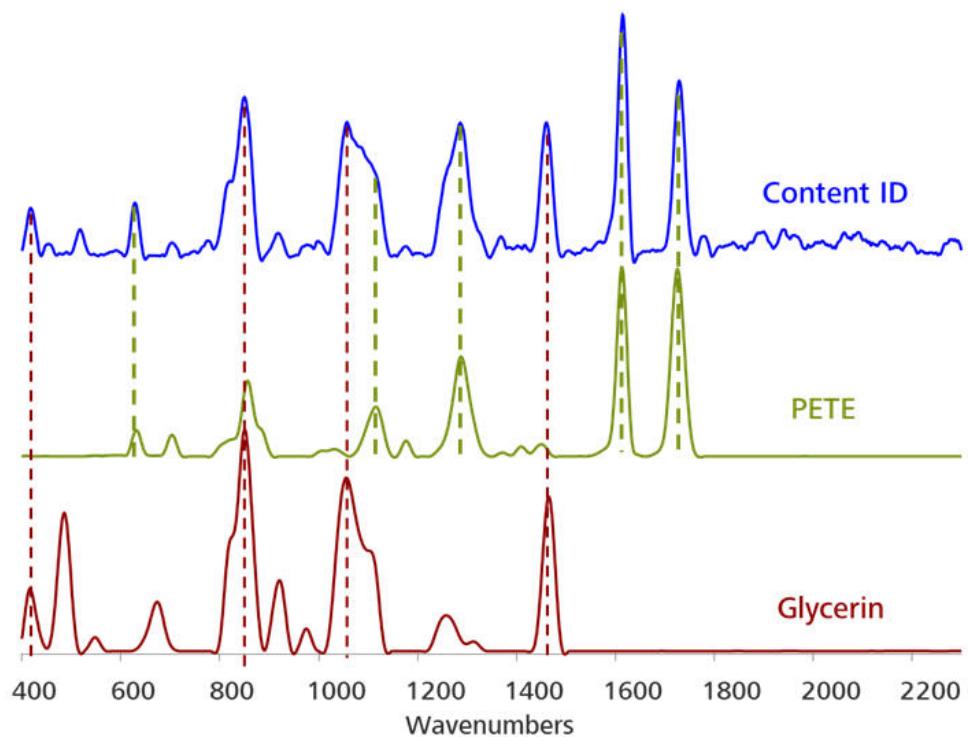


図5. グリセリンと PETE のライブラリスペクトルとコンテンツ ID によって得られたスペクトル

MIRA Cal DS でのコンテンツ ID の結果では、クリセリンのスベクトル比率が約 41% であったことがわかります。PETE は Illicit(不法薬物) ライフラリ内で相関

係数(HQI)0.99 と判定されました。実際の MIRA DS では以下のように結果が表示されます。

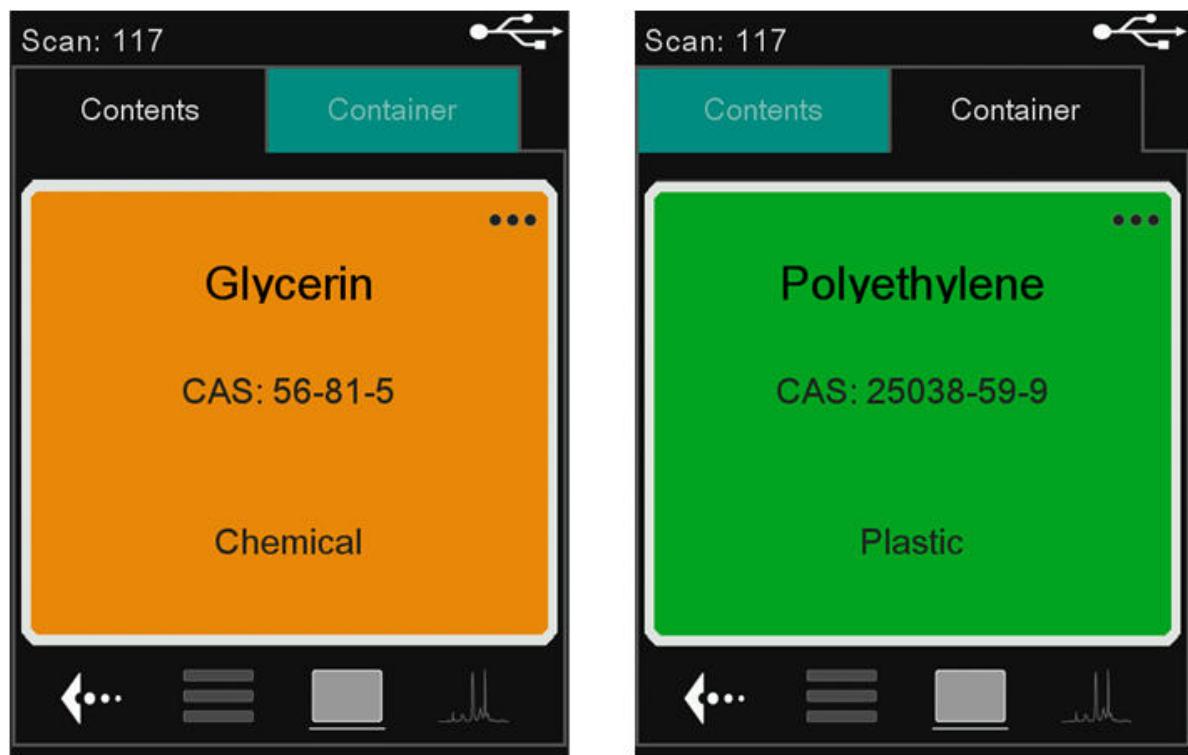


図6. 咳止めシロップの測定結果を表示しているMira DS 画面

コンテンツIDの結果の2つ目の例は、不透明な白い  
プラスチックホトルからアセトアミノフェンを分析

したもののです(下図)。

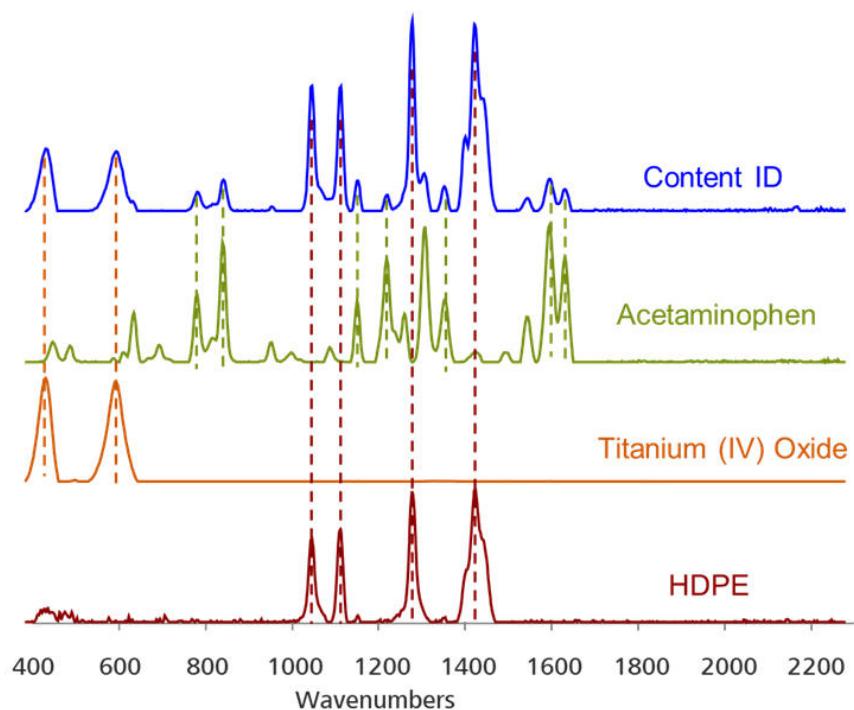


図7. アセトアミノフェン、HDPE、酸化チタンのライブラリスペクトルとコンテンツIDによって得られたスペクトル

これは、MIRA DS の混合物評価と組み合わせたコンテンツIDによって、容器の成分であるプラスチックと着色剤(それぞれ HDPE と酸化チタン)を分析でき

たことに加え、容器内のアセトアミノフェンを正しく識別てきたというユニークな例です。すべての成分がHQI 0.99で同定されました。

表1. このアプリケーションに使用した際のMira DSのスペック

励起波長	785 nm
範囲	400–2300 cm <sup>-1</sup>
アタッチメント	iUA
ファームウェアハーション	8.0.1.136
ソフトウェアハーション	1.1.14
レーザー出力レベル	5
積算露光時間 (秒)	10.0
平均回数	2
ライフラリ	違法薬物(Illlicit)
しきい値(HQI)	0.96

## CONTACT

メトロームジャパン株式会  
社  
143-0006 東京都大田区平  
和島6-1-1  
null 東京流通センター アネ  
ックス9階

metrohm.jp@metrohm.jp

## 装置構成



### MIRA DS Advanced

Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) DS は、薬物、爆発物、出発物質、有害物質などの違法物質の迅速な非破壊測定に使用される、頑丈かつ高性能なハントヘルトラマンスヘクトロメーターです。MIRA DS は、小型な装置ながら極めて堅牢で、弊社独自の軌道走査スキャン (ORS) 技術を搭載した高効率分光器を特長としています。

Advanced package には、校正標準、ホトルまたはハックにおける分析または直接分析のためのユニバーサルアタッチメント、直角アタッチメントが含まれ、表面および(または)ハック内のサンプルの処理に最適です。クラス 3B 操作。MIRA DS は、Metrohm のハントヘルトラマンライフラリに対応しています。