

785 nm および 1064 nm 励起ラマンを使用した紙袋越し(不透明容器越し)の原料受入確認試験容器透過識別機能ラマン分光計

ラマン分光法は、材料の特定の分子情報を得る分子分光法の一つです。ラマン分光法は、化学、材料、医薬品、生物医学の研究や医療診断、および法執行機関によって、迅速、非破壊、非侵襲の同定試験として広く使用されています。ラマン分光法の制限は、サンプルを直接、または透明な容器を通してしか測定できないことです。これは実験室環境では実際には制限ではありませんか、現場でのハントヘルト

機器の場合、サンプルの取り扱いとハッケーシの開封を最小限にして、サンプルをそのまま識別することか優先されます。不透明容器を通したラマン識別は、倉庫での原材料受入れ検査や、ファースト・レスホントー、通関業者、その他の材料に触れることなく迅速に材料を識別する必要がある場合に、この技術をより使いやすくすることかできます。

シースルーラマンテクノロジー

シー・スルー・ラマン分光法(STRaman™)は、ラマン分光法の機能を拡張して、拡散散乱ハッケーシ材料下のサンプルを測定する新たに開発された技術です。従来のラマン分光は、通常、サンプル上のレーザー焦点に、高いパワー密度の非常に小さなサンプリング領域を持ちます。つまり、サンプルの限られた部分のみか測定され、サンプルか加熱または燃焼する可能性があります。STテクノロジーは、これらの問題を克服するように設計されています。この技術は、785 nm および 1064 nm レーザー励起レーザーを備えたホータフルおよびハントヘルトラマ

ンシステムで利用できます。STRaman™テクノロジーは、共焦点アプローチよりもはるかに大きなサンプリング領域を特徴としています。このデザインにより、より深い層からの信号の相対的な強度が強化され、それにより効果的なサンプリング深度が増加し、視覚的に不透明な容器内の材料の測定が可能になります。より大きなサンプリング領域は、パワー密度を下げることでサンプルの損傷を防ぎ、不均一の影響を排除することで測定精度を向上させるという更なる利点があります。

詳しくは動画視聴

測定例

我々は 785 nm STRam の、白色ポリエチレンボトルや固形剤の一般的な容器、他の白封筒やマニラ封筒などの不透明なパッケージ越しの識別能力を実証しました。(1,2) このテクノロジーのサンプリング深度の増加のため、不透明層下にあるさまざまな材料のスペクトルが収集されます。高度な識別アルゴリズムと組み合わせて、パッケージのラマン信号の寄与が除去され、サンプルが正しく識別されます。785 nm 励起の STRaman™ テクノロジーにより、着色プラスチック、マルチ不透明層、厚いガラス越しの識別が可能で、白い PE ボトル内の安息香酸

ナトリウムの識別の例を図 1 に示します。コーティングされたタフレットも、シースルーテクノロジーによりコーティング層を貫通し、下にあるタフレットのラマンスペクトルを測定するため、識別する事ができます。また、システムのパワー密度は、従来のラマンで使用される強く集束されたものよりも低いため、表面のレーザー燃焼なく、着色された錠剤コーティングや暗い色のサンプルでも測定できます。図 2 は、フルレーザーパワーの STRam で燃焼せずに収集した黒色粉末のラマンスペクトルを示しています。

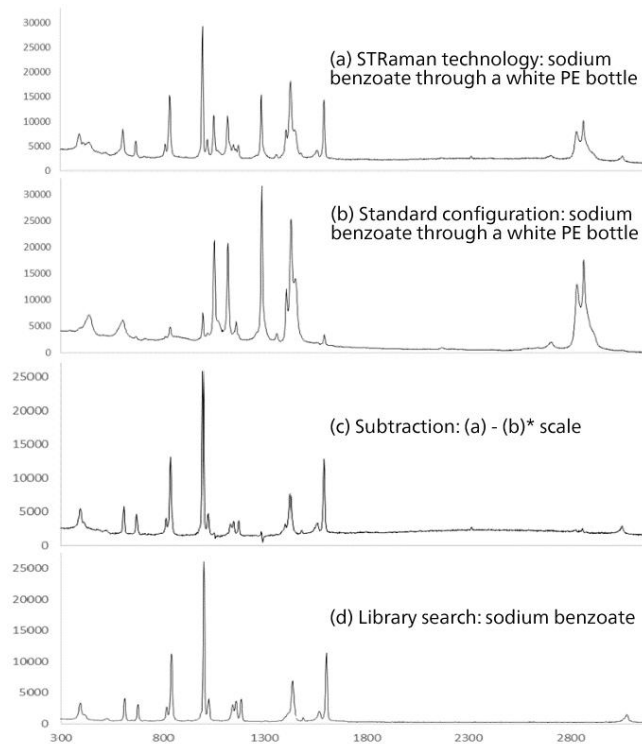


図 1. 白いポリエチレンボトルを介した安息香酸ナトリウムの STRam 識別： (a) STRaman™ テクノロジーを使用してボトルを通して測定されたスペクトル (b) 標準ラマン構成で測定されたスペクトル (c) (a) から (b) を減算した結果 (d) 安息香酸ナトリウムの純粋なスペクトル

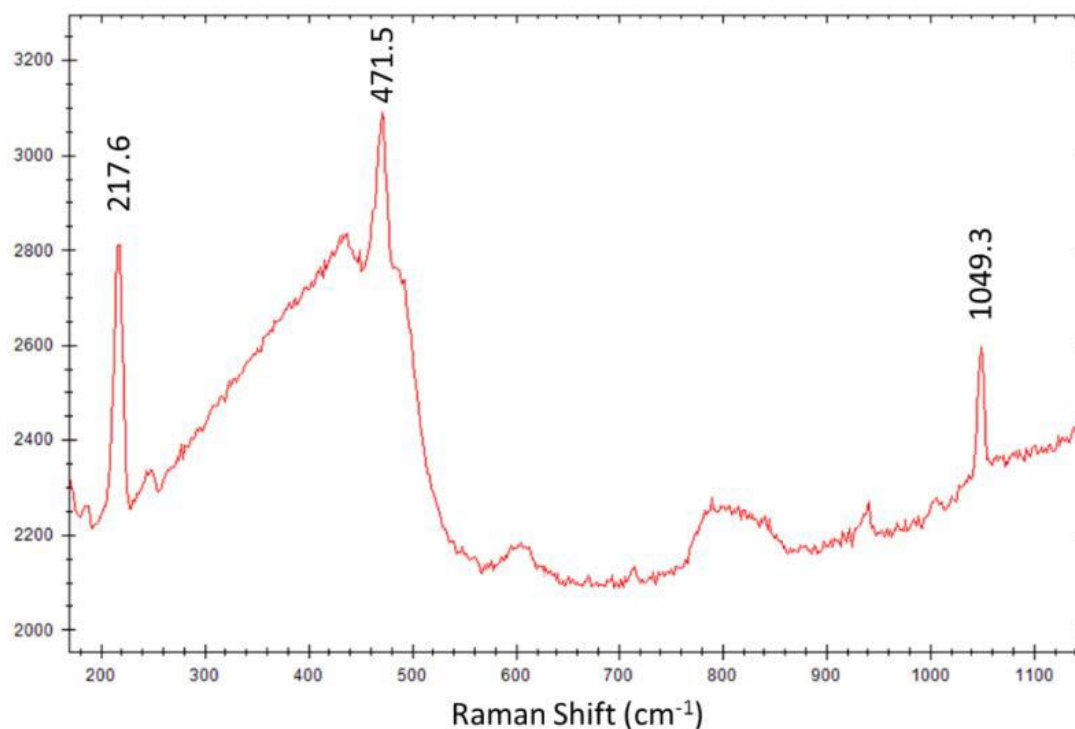


図 2. 暗い粉末の STRaman スペクトル

多くの原材料は、単層または多層のクラフト紙袋で供給されますが、場合によってはプラスチックの裏地層も付いています。茶色のクラフト紙は、他の多くの暗い色の材料と同様に、785 nm ラマンで測定すると強い蛍光を発します。STRaman テクノロジーを我々の 1064 nm ラマンシステムに適用すると、このような困難なパッケージング材料でも材料識別が可能になります。例として、製薬会社で原料の容器として使用される複数の異なる多層紙袋を入手し、一般的に使用されるラマン散乱強度が異なるいくつかの賦形剤を選び、1064 nm 励起の STRamanTM の紙袋越し識別能力をテストしました

。表 1 に示すように、炭酸カルシウムよりも約 40 倍弱い最も弱いラマン活性物質であるリン酸三ナトリウムでさえも確実に識別されます(これは、正しい化学物質が上位ヒットとしてリストされ、ヒットクオリティインテックス(HQI)が設定されたしきい値を超え、2 番目のヒットよりも設定マージン高いことを意味します。これらのテストでは HQI しきい値は 85 に設定され、マージンが 2 に設定されています)。しかしながら、785 nm の励起では、リン酸三ナトリウムは白いクラフトペーパーパックでのみ正常に識別できます。

Packaging Material	Calcium Carbonate (CaCO ₃)	Dextrin	Cyclodextrin	d-Maltose H ₂ O	Trisodium Phosphate (Na ₃ PO ₄)
2 layers: 1 white kraft + 1 brown kraft	97.7	96.7	95.6	93.8	93.2
2 layers of brown kraft	97.6	92.2	91.6	90.9	88.7
2 layers of white paper	96.8	98.025	95.2	95.0	94.9
2 layers: 1 white kraft paper with blue bands + 1 brown kraft paper	95.1	92.8	91.4	91.35	89.0
2 layers: 1 white paper + 1 woven fiber	96.2	95.7	93.2	92.6	91.1
3 layers: 1 white kraft + 1 plastic film + 1 brown kraft	96.1	91.8	92.0	90.7	88.4
3 layers: 1 white kraft + 2 brown kraft	97.4	94.6	94.0	92.9	93.0

表 1. 1064 nm STRam システムを使用したクラフト紙袋中のサンプルの同定

図 3 は、白と茶色のクラフトペーパーの 2 層袋を通して測定したリン酸三ナトリウムのスペクトルを示しており、ライブラリ検索結果は良好です。スペクトルは紙袋の蛍光とラマンの特徴によって支配され

ますか、STRaman で使用されるアルゴリズムは、そこからリン酸三ナトリウムのシグネチャを抽出し、確実に識別することかできます。

STRAM の利点

STRam テクノロジーのその他のアトハンテシは、サンプリング領域が広いことです。これにより、ラマンをより幅広く使用することかでき、混合粉末や天然物のような不均一なサンプルに対してはより

再現性の高い結果を与えることかできます。ハッチェーション内のサンプルを測定する能力、サンプル調製の必要性をなくすことは、ラマンの主なアトハンテシの 1 つです。

結論

STRaman テクノロジーによってもたらされた進歩により、不透明なハッチェーション(白いプラスチックボトルから繊維袋、クラフト紙袋、封筒、さらには皮膚まで)を介した測定に、さらに一歩踏み込んで、多くの作業環境でこの分光ツールを簡単に採用できるようにになりました。785 nm と 1064 nm の両方のレ

ーサー励起の技術開発により、蛍光の影響を受ける暗い色の濃いハッチェーションにも対応します。これにより、以前は使用可能なツールではなかった多くの新しい潜在的なユーザーに対してラマン分光法が開かれます。

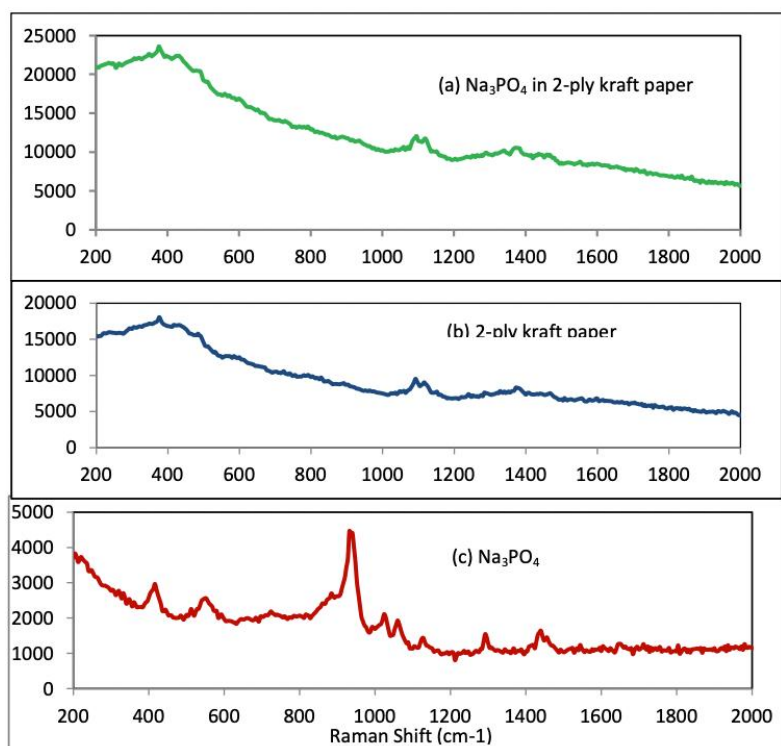


Figure 3. 白と茶色のクラフトペーパー二重袋内のリン酸三ナトリウムの 1064 nm STRam (a) STRaman™テクノロジーを使って二層袋を通して測定されたスペクトル (b) 標準ラマン構成で測定された二重層バッグのスペクトル (c) リン酸三ナトリウムの純スペクトル

参考文献

1. J. Zhao, K.A. Bakeev, J. Zhou, "Raman Spectroscopy Peers Through Packaging", Photonics Spectra, February 2018, https://www.photonics.com/a62932/Raman_Spectroscopy_Peers_Through_Packaging.
2. K.A. Bakeev, "See-Through Science", The Analytical Scientist, May 2018, <https://theanalyticalscientist.com/issues/0518/see-through-science/>.

さらに詳しくは

関連アプリケーション

[ハッケーシ越し識別関連のラマン分光計アプリケーション](#)

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