


# 分子分光分析の基礎: ハードウェア編

**BUILDING**  
BETTER SCIENCE

AGILENT AND YOU



アジレントは教育機関の活動をサポートし、当社が所有する資料の使用機会を積極的に提供しています。

---

本スライドセットはアジレントによって制作されています。  
使用目的は教育目的のみに限定されています。

画像、略図、図をその他の目的に使用する場合は、事前にアジレントまでお問い合わせください。

# 目次

## 概要

- 分類

## 分子分光光度計

- 概要
- 開発初期の年表

- UV-Vis 分光光度計

- 構成の概要
- 光源
- 分光器
- 検出器
- システム
- 定性および定量分析
- 用途
- 例
- 性能

- 蛍光分光光度計

- 構成の概要
- 光源
- システム
- 用途
- 例
- 性能

## フーリエ変換赤外分光光度計

- 構成の概要
- インターフェログラム
- 定性および定量分析
- システム
- 用途
- 例
- 性能
- 詳細情報



# 概要

## 分類

分光分析は多くの幅広い学問分野で利用され、分析対象物質の種類ごとに分類できます。

このプレゼンテーションでは、分子分光光度計について説明します。

### 原子

#### 原子分光光度計

- AAS
- MP-AES
- ICP-OES
- ICP-MS

### 分子

#### 分子分光光度計

- UV-Vis
- UV-Vis-NIR
- FTIR
- 分光光度計

### 結晶

- X線結晶構造解析

### 核

- 核磁気共鳴

# 分子分光光度計

## 概要

原子と分子の組み合わせによって固有のエネルギー状態となるため、エネルギー準位間の遷移の際に特有のスペクトルが生まれます。

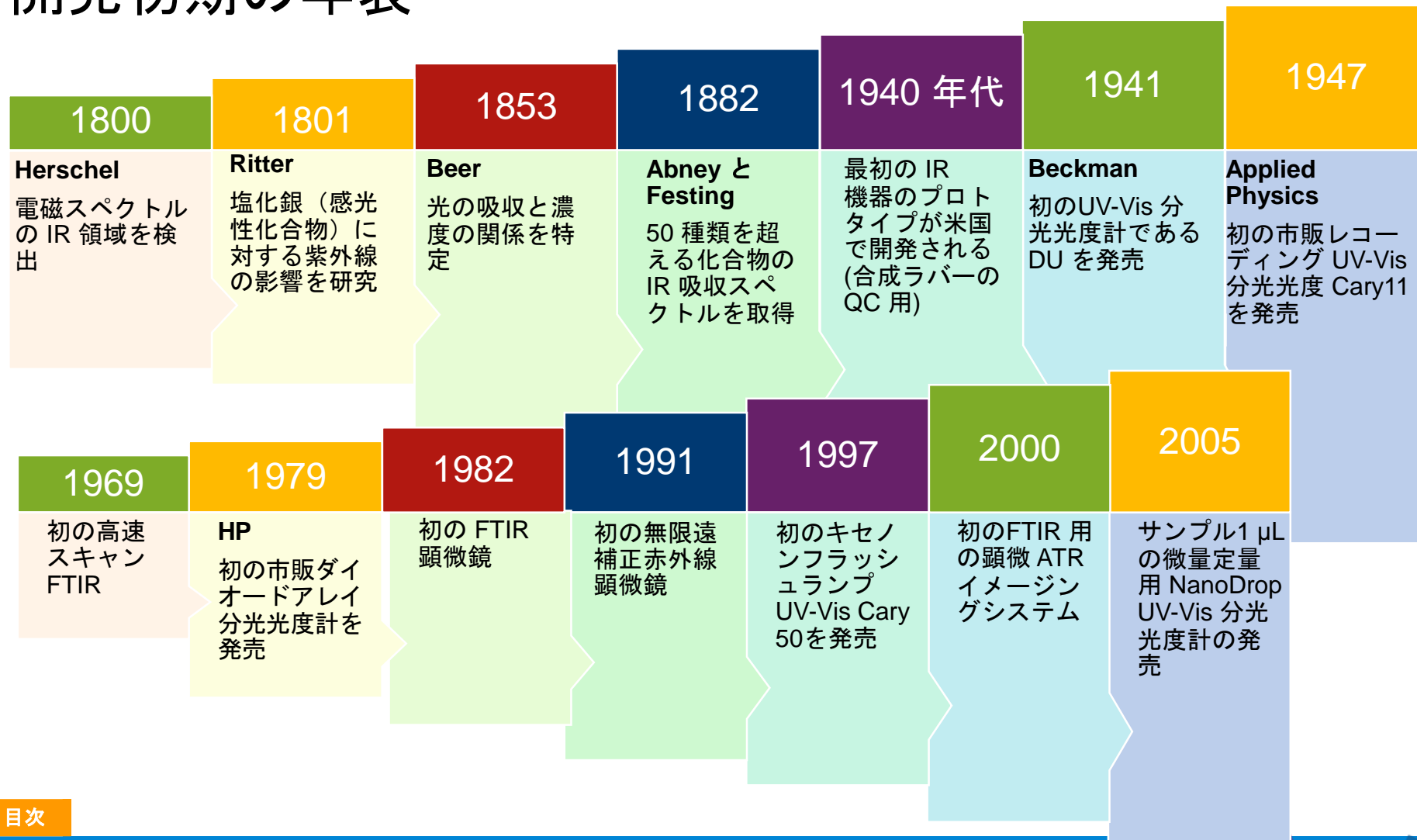
分子スペクトルは、以下から取得できます。

- 電子スピン状態
- 分子回転
- 分子振動
- 電子状態

### 分子分光光度計

用途	
UV-Vis	紫外線、可視光線、近赤外線 の電磁エネルギーと物質の 相互作用の研究
FTIR	赤外線 の電磁エネルギーと物質の 相互作用の研究
分光光度計	通常の紫外線および可視光線の電 磁エネルギーと物質の相互作用後 の、電磁エネルギー放出の研究

# 分子分光光度計 開発初期の年表



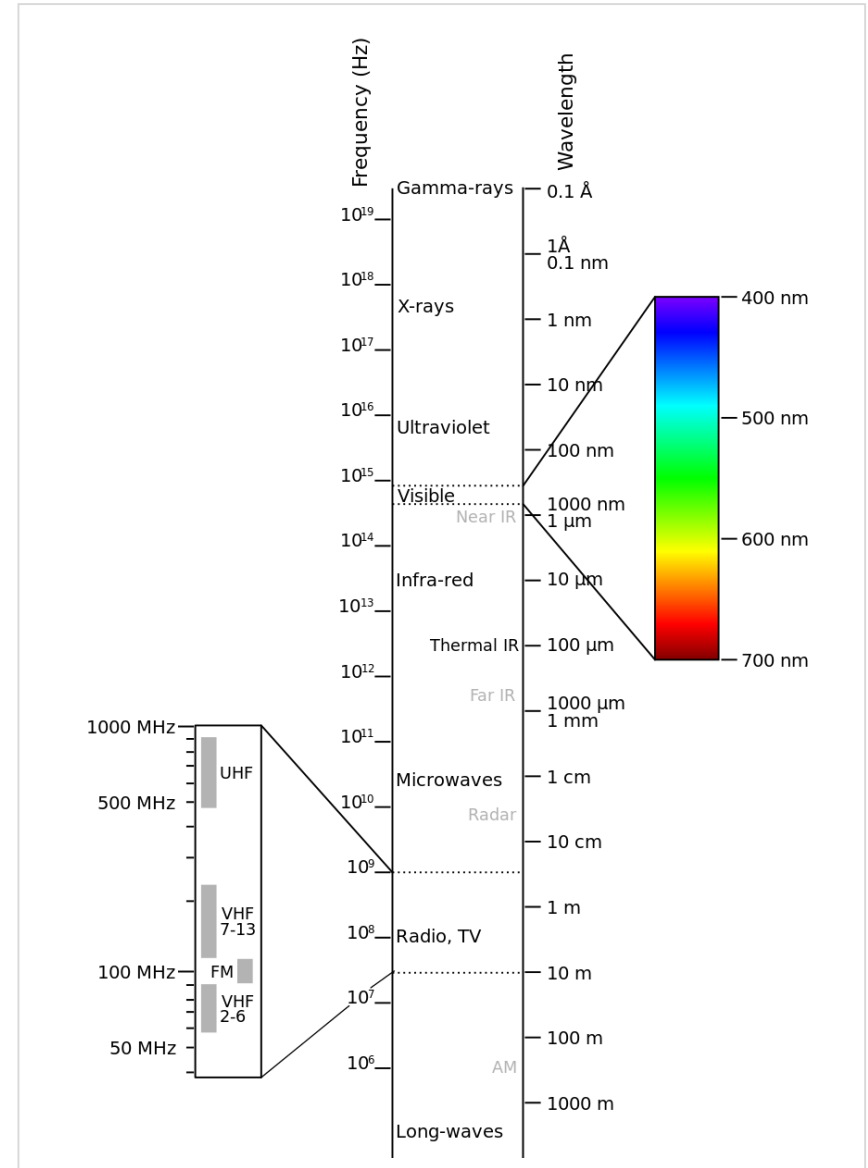
# UV-Vis 分光光度計

## 概要

電磁スペクトルは、その周波数と波長が非常に広い領域にわたります。可視光線は電磁スペクトルのほんの一部にすぎません。

- 紫外線: 190 ~ 400 nm
- 可視光線: 400 ~ 800 nm
- 赤外線: 800 ~ 100,000 nm

Victor Blacus による  
「電磁スペクトル」



出典: [Wikipedia](#)

# UV-Vis 分光光度計

## 概要

分光光度計は、サンプルを透過する光の量や、サンプルから反射される光の量を測定します。

研究用分光光度計はすべて、約 190 nm (中間紫外線) ~ 900 nm (近赤外線) 以上の波長で透過または反射される光の割合を、2 nm 以下の分解能で測定できます。

溶液の場合、透過光は吸光度として表され、濃度に比例します。





# UV-Vis 分光光度計

## 構成の概要

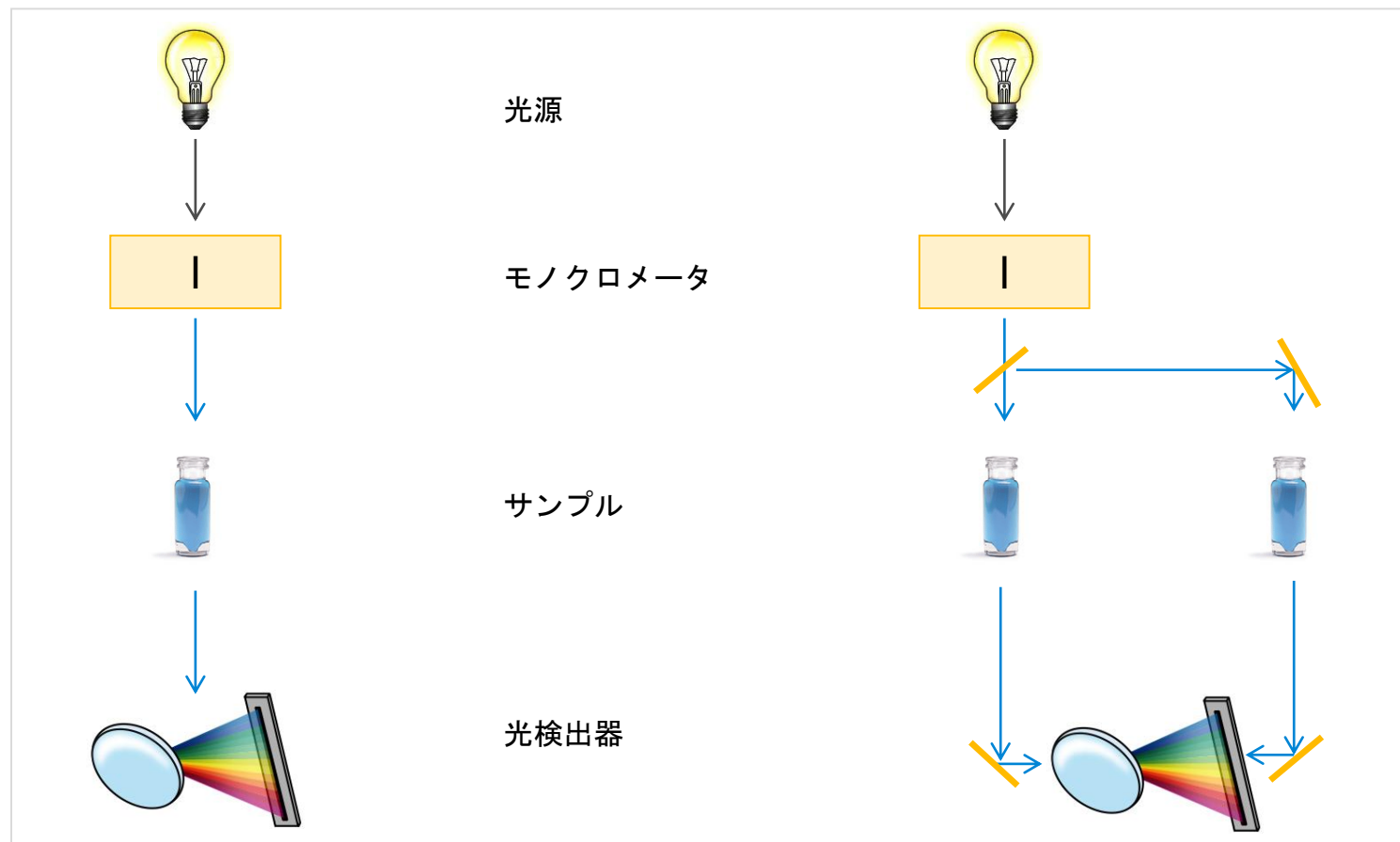


- ランプ (光源) がさまざまな波長で発光する
- モノクロメータ (分光器) が波長を選択する
- 分析対象物が光を吸収する (試料室)
- 透過光を測定する (検出器)
- 標準溶液との比較で濃度を決定する

# UV-Vis 分光光度計

## 構成の概要:

## シングルビームとダブルビームの分光光度計の比較



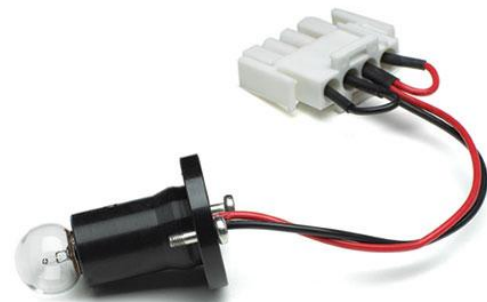
ダブルビーム方式によって、光の強度のばらつきを補正できます。

# UV-Vis 分光光度計 光源

すべての波長にわたり、少ないノイズで長期間安定して一貫した強度を維持できる光源が理想的です。

UV-Vis 分光光度計で通常使用される光源は次のとおりです。

- **重水素アークランプ** → 紫外領域に適しています
- **タングステンハロゲンランプ** → 紫外領域の一部と可視領域全般に適しています
- **キセノンランプ** → 紫外可視領域全般に適しています



UV-Vis 分光光度計で使用する重水素ランプ(上)と  
タングステンハロゲンランプ(下)

# UV-Vis 分光光度計

## 分光器

分光器は、光の波長をさまざまな角度で分光します。分光器において適切な射出スリットを組み合わせると、光源から特定の光の波長(より厳密には狭い波長帯)を取り出すことができます。

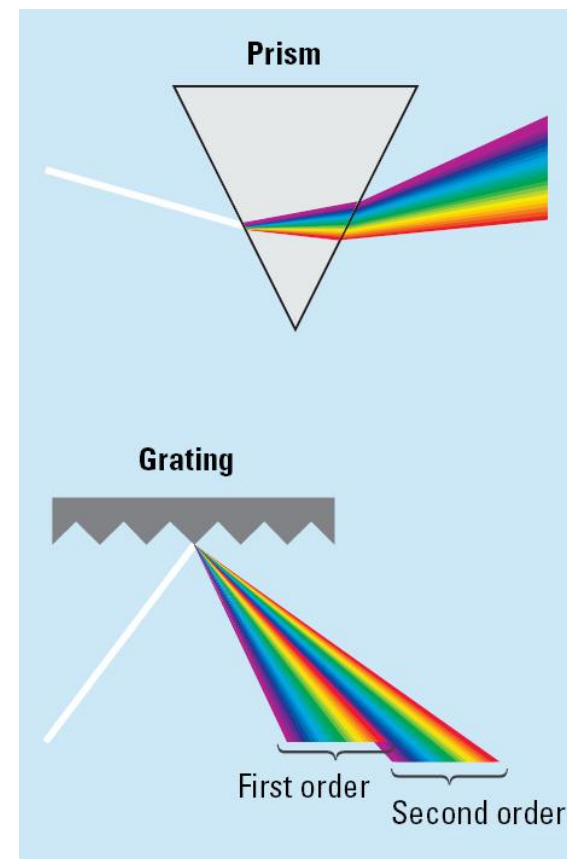
分光器には、次の 2 種類があります。

- プリズム

太陽光から虹を生成します。分散角度が温度の影響を受けやすいのが欠点です。

- ホログラフィック回折格子

温度の影響を受けにくく、回折格子に当たった光が、波長によってさまざまな角度で反射します。



分光器の概略図  
最近のほとんどの  
分光光度計では、  
回折格子分散が使用  
されている

# UV-Vis 分光光度計 検出器

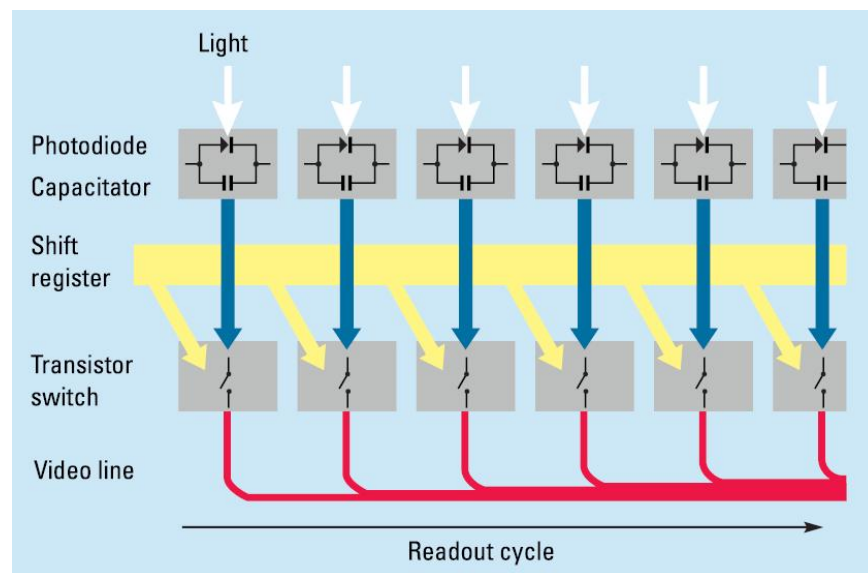
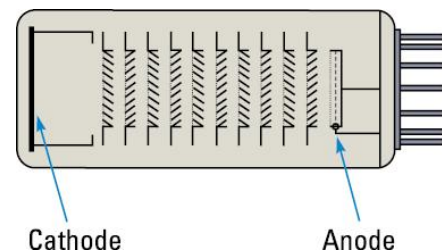
検出器は、光信号を電気信号に変換します。  
低ノイズ、高感度、広い範囲で直線的  
レスポンスを出力するのが理想的です。

## 光電子増倍管検出器

チューブ内で信号変換と数段階の増幅を組み  
合わせて、波長範囲全体をスキャンします。

## フォトダイオード検出器

半導体材料に光が当たると、その箇所に電子  
が流れるため、その材料に接続されているコン  
デンサの電荷が減ります。コンデンサの再  
充電に必要な電荷量は、光の強度に比例しま  
す。波長範囲全体を1回の読み取りで測定で  
きます。

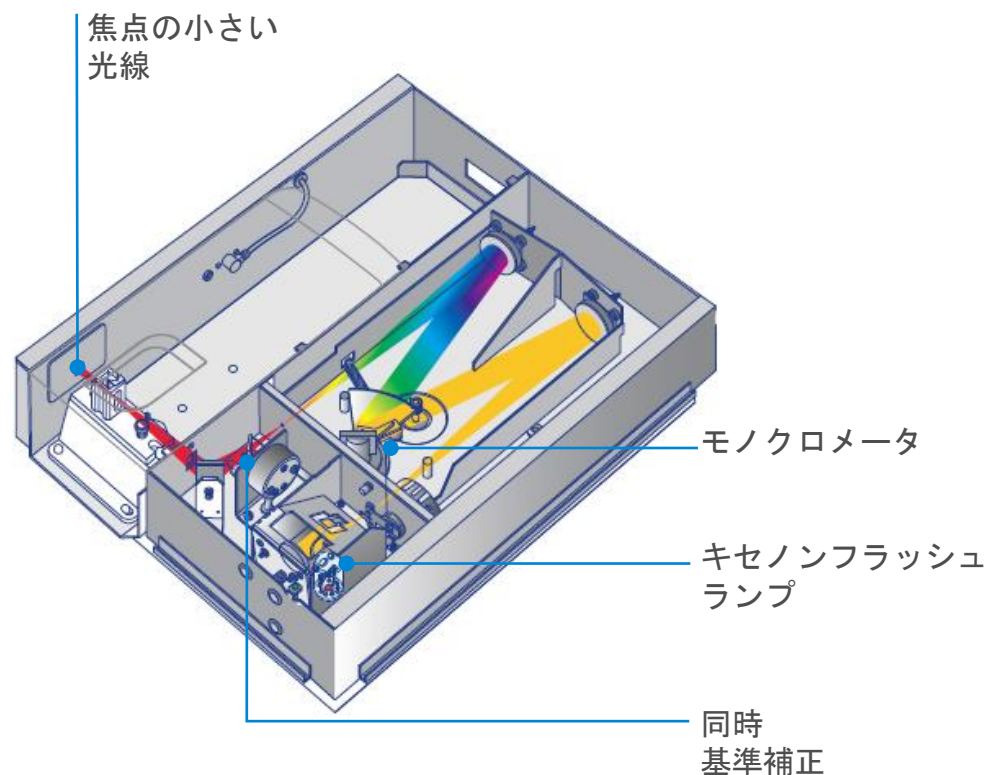


光電子増倍管検出器 (上) と  
フォトダイオードアレイ (下) の概略図

# UV-Vis 分光光度計 システム

## 主な用途

- カイネティクスのモニタリング
- 未知または新たな合成化合物の特性解析
- DNA の純度の評価
- DNA とタンパク質の定量
- 水、食品、農産物内の栄養素の分析



# UV-Vis 分光光度計

## 定性および定量分析

紫外可視スペクトルでは通常、数個の広い吸収バンドが示されます。有機化合物による吸収はほとんどの場合、 $\pi$  (不飽和) 結合の存在によるものです。発色団は、通常  $\pi$  結合が含まれる分子です。(紫外可視吸収スペクトルがない) 飽和炭化水素に発色団を挿入すると、185 ~ 1,000 nm に吸収をもつ化合物が生成されます。

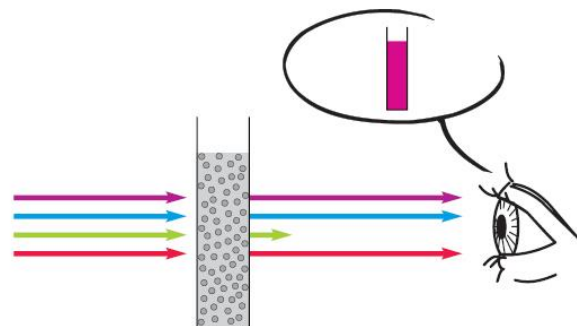
代表的な発色団とその最大吸収波長			
発色団	分子式	例	$\lambda_{\text{max}}$ (nm)
カルボニル (ケトン)	$\text{RR}'\text{C}=\text{O}$	アセトン	271
カルボニル (アルデヒド)	$\text{RHC}=\text{O}$	アセトアルデヒド	293
カルボキシル	$\text{RCOOH}$	酢酸	204
アミド	$\text{RCONH}_2$	アセトアミド	208
ニトロ	$\text{RNO}_2$	ニトロメタン	271



# UV-Vis 分光光度計

## 定性および定量分析

色は物質の重要な特性です。物質の色は、その吸収性や反射性に関連します。人の目は、物質に吸収される補色を認識しています。



透過と色 (上)  
吸収と補色 (下)

	Wavelength [nm]	Absorbed color	Complementary color
800	650-780	red	blue-green
700	595-650	orange	greenish blue
600	560-595	yellow-green	purple
500	500-560	green	red-purple
400	490-500	bluish green	red
	480-490	greenish blue	orange
	435-480	blue	yellow
	380-435	violet	yellow-green

出典: [Fundamentals of UV-visible spectroscopy](#)



# UV-Vis 分光光度計

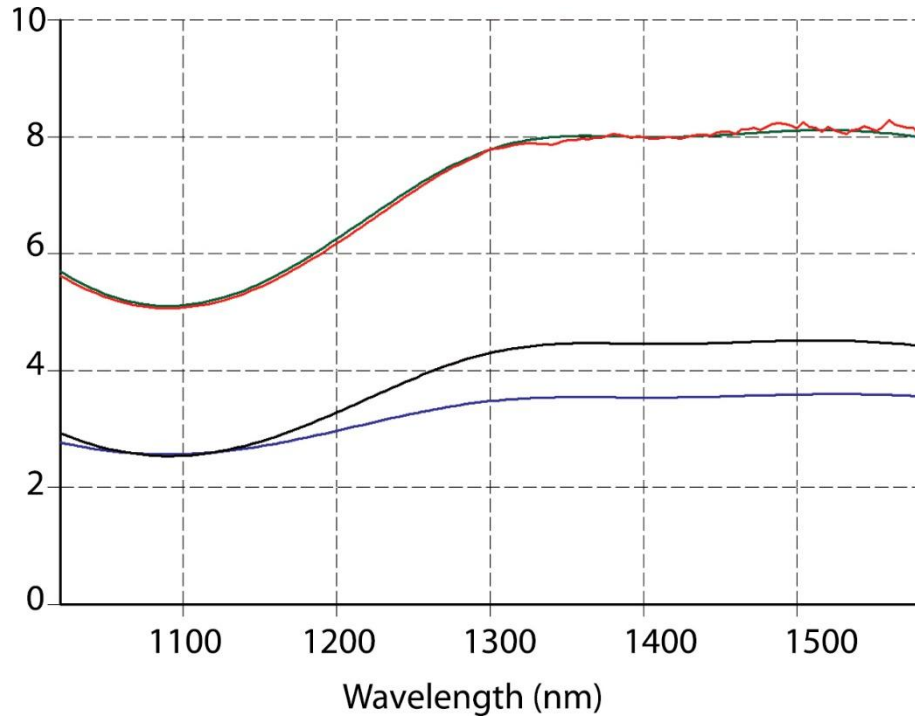
## 用途

市場	用途
材料	<p>バルク材料</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• 光学部品: フィルタ、レンズ、ミラー、ビームスプリッタ、偏光子、ガラス</li><li>• 薄膜、光学および反射防止コーティング、ナノ複合体材料、塗料、太陽電池</li><li>• 安全ゴーグル</li><li>• パルプおよび紙</li><li>• カモフラージュ材料</li><li>• サングラス</li><li>• 繊維/布地</li></ul>
化学	<ul style="list-style-type: none"><li>• 製造の原材料の QA/QC および最終製品</li><li>• 化学的プロセスの化学的同定または研究: 合成化学分野、光化学の研究、ナノ粒子の特性解析、界面化学の研究</li><li>• 分析化学</li><li>• 色測定: 塗料と布地 (カラーマッチング、繊維の QA/QC、SPF 測定)</li></ul>
バイオテクノロジーと医薬品	<ul style="list-style-type: none"><li>• 薬物結合の分析</li><li>• 酵素反応</li><li>• 濁度サンプル、組織、細胞のホモジネートの分析</li><li>• 細胞内イオンの測定</li><li>• 核酸 (RNA/DNA) とタンパク質の特定</li><li>• DNA とタンパク質の変性/再生の測定</li></ul>



# UV-Vis 分光光度計

## ショットガラスフィルタの吸光度の測定



UG11 フィルタ 1 (青)、UG11 フィルタ 2 (黒)、UG11 フィルタ 1 および UG 11 フィルタ 2 の組み合わせ (赤) のスペクトル。緑のスペクトルは、青および黒のスペクトルの追加に基づく予測値を示しています。

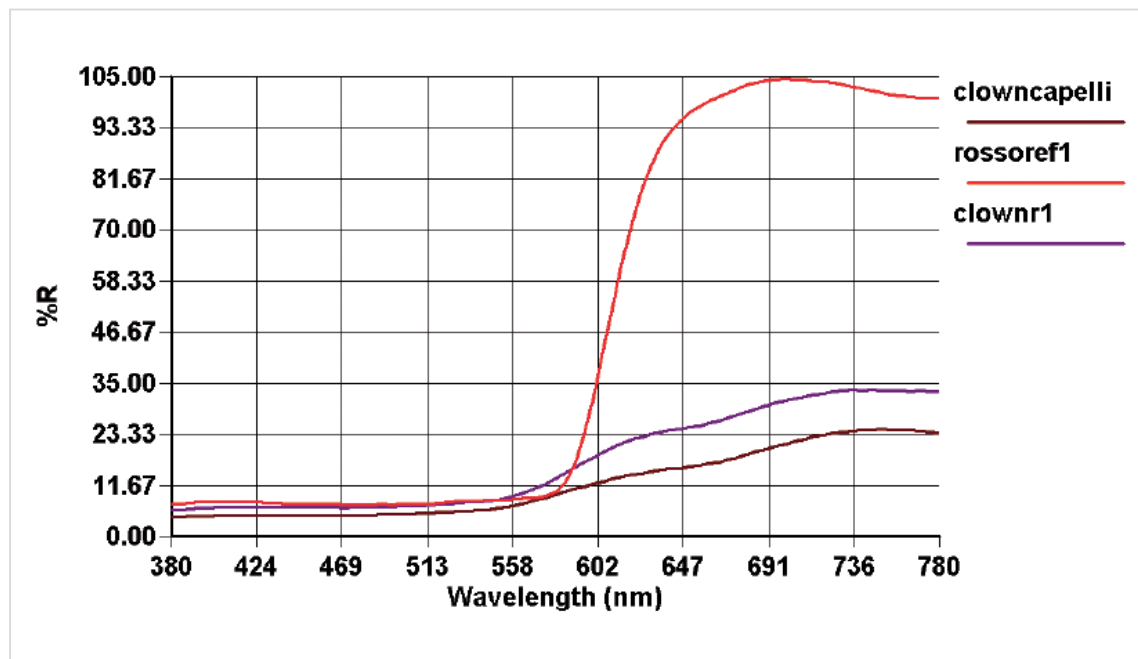
2 つのフィルタは個別に測定され、計算上追加されています (予測値)。これらの結果は、2 つのフィルタを一緒に測定した場合と同じです (測定値)。

# UV-Vis 分光光度計

## カンバス塗料の色の測定



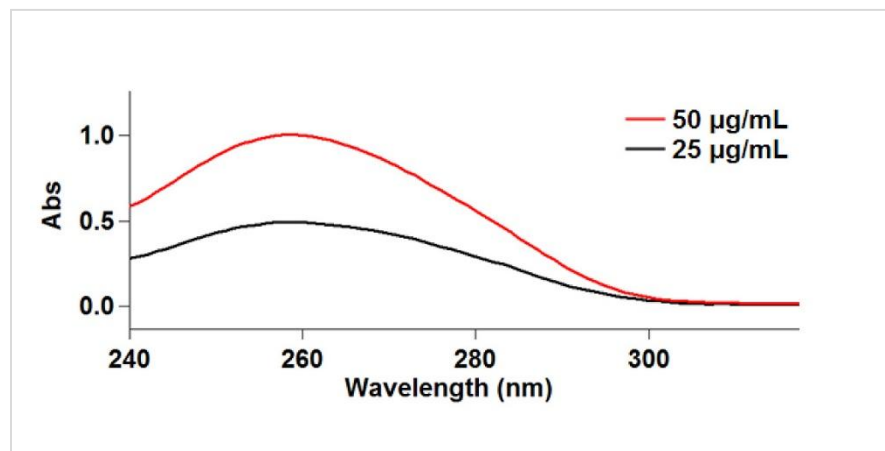
スペクトルは、サンプル clownnr1 と clowncapelli が類似の材料で構成されていることを示しています。



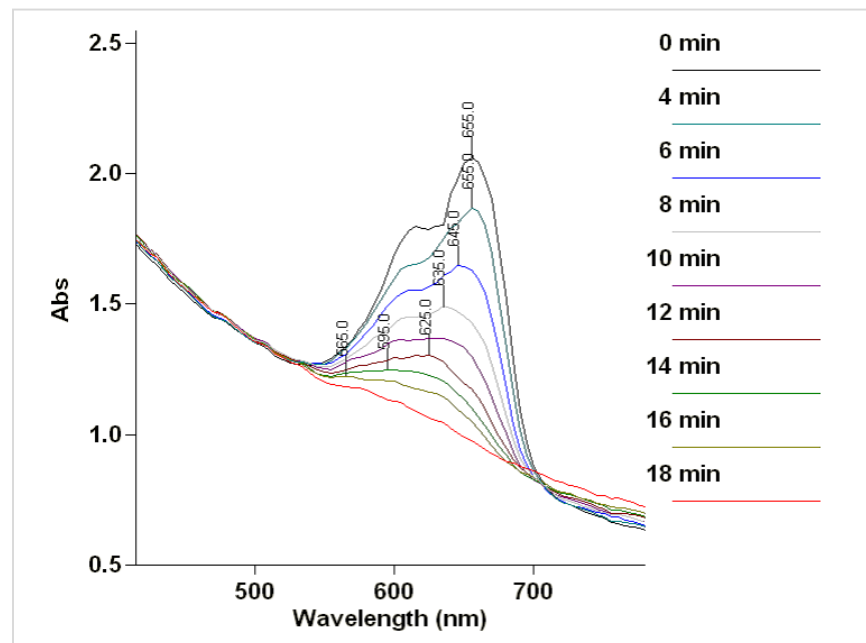
出典: [Measuring the color of a paint on canvas directly with external diffuse reflectance using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer](#)

# UV-Vis 分光光度計

## 純度分析とカインेटクス分析



150 µL の DNA サンプルを 4 °C で 2 種類の濃度でスキャンした場合、吸収ピークは 260 nm です。 50 µg/mL の DNA (吸光度単位 1.0) と 25 µg/mL の DNA (吸光度単位 0.5) でピークの吸光度を比較すると、Beer-Lambert の法則に依存していることがわかります。



強度の高い UV ランプ (Oriell 500 W Hg(Xe) ランプ) 曝露下のメチレンブルーにおける、光ファイバーによるカインेटクスのスキャン (400 ~ 800 nm の範囲内で 20 分)。ラベルは最大吸収波長を反映したものです。

出典: [Measuring the purity of low volumes of DNA at 4 °C using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics microprobe](#)

出典: [Simple, automated measurements of the photocatalytic properties of colorimetric species using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics](#)

# UV-Vis 分光光度計 性能

紫外可視光を使用した場合、吸光度と濃度の関係はシンプルで直線的になり測定も比較的簡単です。

このため紫外可視分光光度計は、非常に多くの定量分析方法の基本となっています。

## UV-Vis 分光光度計

### 利点

- 定性および定量分析に適した幅広い用途
- 多くの有機/無機分子およびイオンに使用可能
- 使いやすさ
- 高速
- 容易なメンテナンス
- 非破壊的測定

### 短所

- 蛍光分光光度計と比べて、検出下限が高い(劣る)
- 吸収バンドの重複が干渉する場合がある
- D2 および QI の光源を使用した場合、感光性の高い化合物では測定が難しい場合がある(キセノン光源を使用した場合は該当しない)

# 蛍光分光光度計

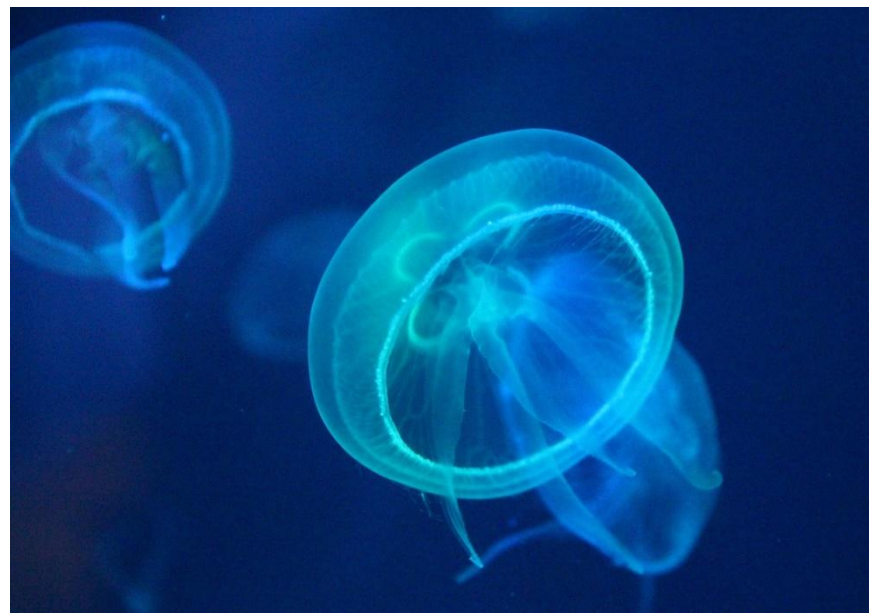
## 概要

蛍光は、高エネルギー光子による励起の後に発生する光子の発光です。

蛍光分光光度計は高感度 (ピコモル) です。他の分光光度計とは異なり微弱なバックグラウンドも測定するためです。

研究用の機器では、励起光と蛍光の両方にスキャンモノクロメータを使っています。

多くの蛍光分光光度計では、リン光と発光も測定できます。



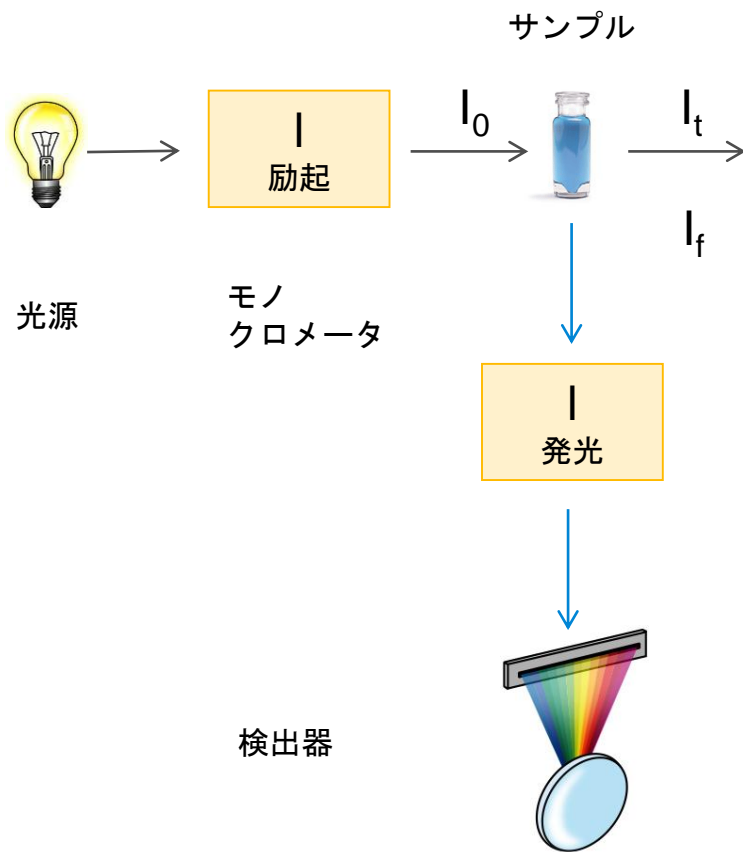
# 蛍光分光光度計 構成の概要



- ランプ (光源) がさまざまな波長で発光する
- モノクロメータが励起波長を選択する
- 試料室でサンプルを保持し、分析対象物が光を吸収する
- 長波長側で発光する
- モノクロメータが発光波長を選択する
- 透過光を測定する (検出器)

# 蛍光分光光度計

## 構成の概要



注: 検出器と光源は直線上に配置しません。透過/反射した入射光が検出器に達するリスクを最小限に抑えるためです。



# 蛍光分光光度計 光源

蛍光分光光度計では、さまざまな光源が使用されています。

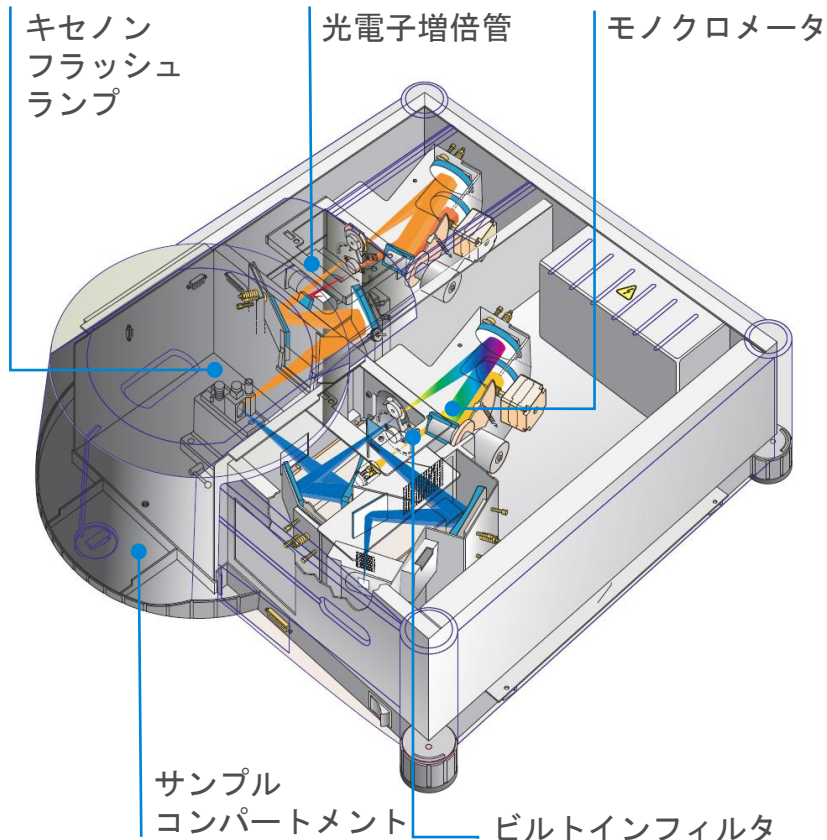
- キセノンランプ: 一定した強度をもち300 ~ 800 nm において連続的な発光スペクトルが得られる
- 水銀ランプ: 回線ランプであるため、ほぼピーク時の波長で発光
- レーザー: 波長の選択が限定的、実質的に変更不可



# 蛍光分光光度計 システム

## 主な用途

- 生体触媒の熱安定性
- 生細胞イメージングにおける生体標識の特性解析
- 石油の炭化水素混合物
- GPCR オリゴマー形成の特性解析

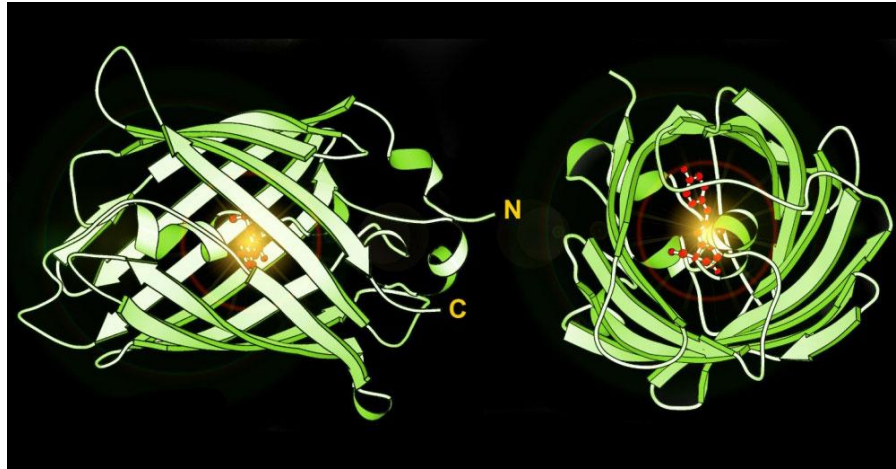


# 蛍光分光光度計 用途

市場	用途
化学	<ul style="list-style-type: none"><li>• 光化学の研究</li><li>• ナノ粒子の特性解析</li><li>• 界面化学の研究</li><li>• 分析化学</li></ul>
医薬品と バイオ テクノロジー	<ul style="list-style-type: none"><li>• 生化学と生物物理学の研究</li><li>• タンパク質の定量と構造の研究: タンパク質間の相互作用、膜の研究</li><li>• 酵素学: 蛍光基質を使った酵素カインेटィクス</li><li>• 分子生物学: DNA と RNA の定量</li></ul>

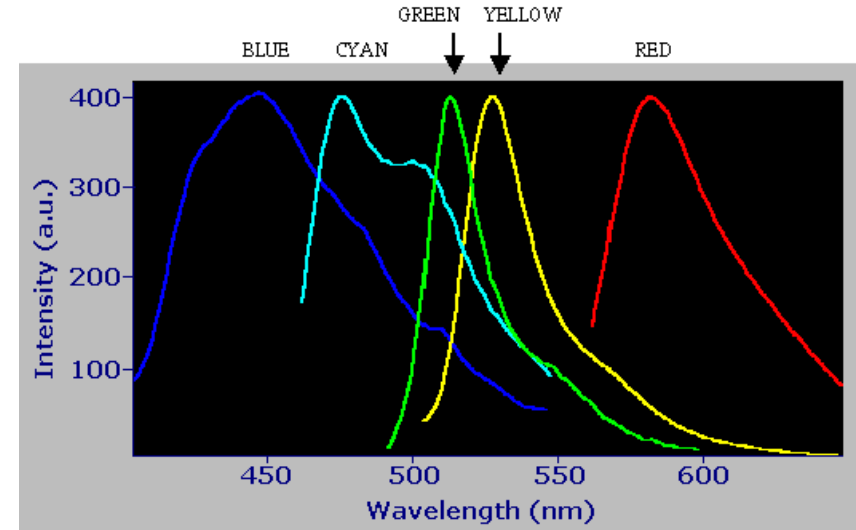
# 蛍光分光光度計

## 緑色蛍光タンパク質 (GFP) の細胞質発現



GFPの概略図

(左): トリペプチド蛍光色素分子 (赤)

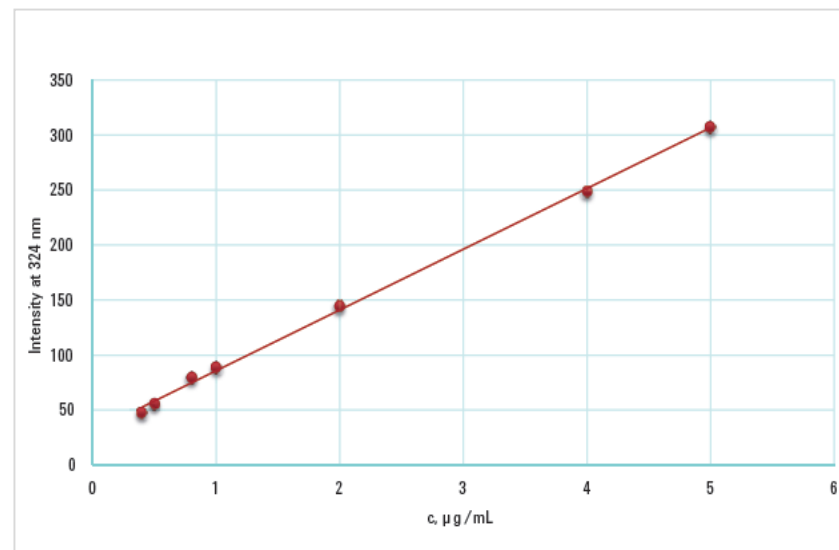
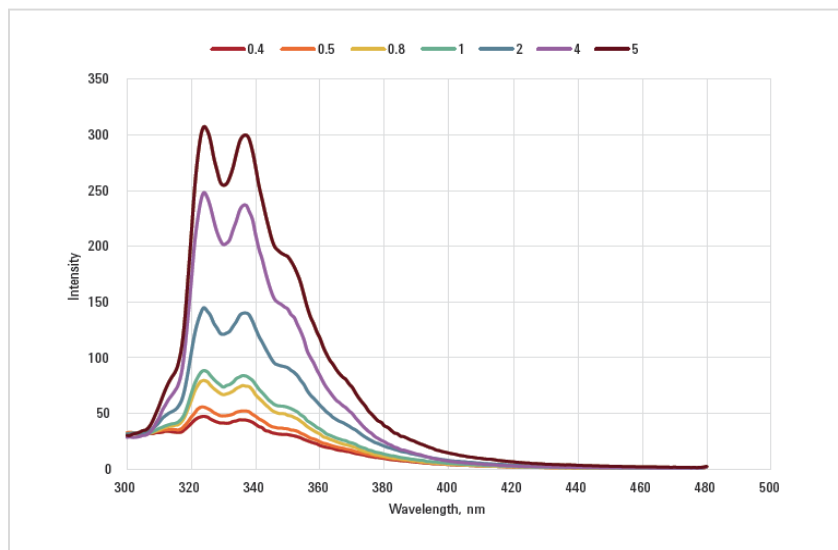


(右): 蛍光タンパク質 (古スペクトル) の強度と発光の比較

出典: [Cytosolic expression of Green Fluorescent Protein \(GFP\) and its derivatives in the yeast \*Saccharomyces cerevisiae\*: Detection in vivo using the Agilent Cary Eclipse](#)

# 蛍光分光光度計

## 多環芳香族炭化水素または石油の定量



(左) ナフタレンの蛍光スペクトル; Ex. 波長 250 nm、Ex. スリット 10 nm、Em. スリット 5 nm

(右) 324 nm でのナフタレンの蛍光測定の検量線 (同じ濃度が平均化されるポイント); Ex. 波長 250 nm、Ex. スリット 10 nm  
Em. スリット 5 nm

出典: [Quantification of complex polycyclic aromatic hydrocarbons or petroleum oils in water with Cary eclipse fluorescence spectrophotometer According to astm d 5412-93 \(2000\)](#)

# 蛍光分光光度計 性能

低濃度での蛍光強度は通常、蛍光色素分子の濃度に比例します。

クエンチング（消光）効果が結果に影響する場合があります。クエンチングは特定の物質の蛍光強度を低下させ、励起状態の反応または衝突クエンチングなどのさまざまな問題を引き起こす可能性があります。

## 蛍光分光光度計

### 利点

- 芳香族化合物や不飽和化合物に対する感度が非常に高い
- 誘導体化やタグなどによって、他の化合物に適用可能
- 使いやすさ
- 容易なメンテナンス

### 短所

- 特定の種類の化合物に限定される
- 混合物では精製が必要な場合がある
- クエンチングの可能性

# フーリエ変換赤外分光光度計

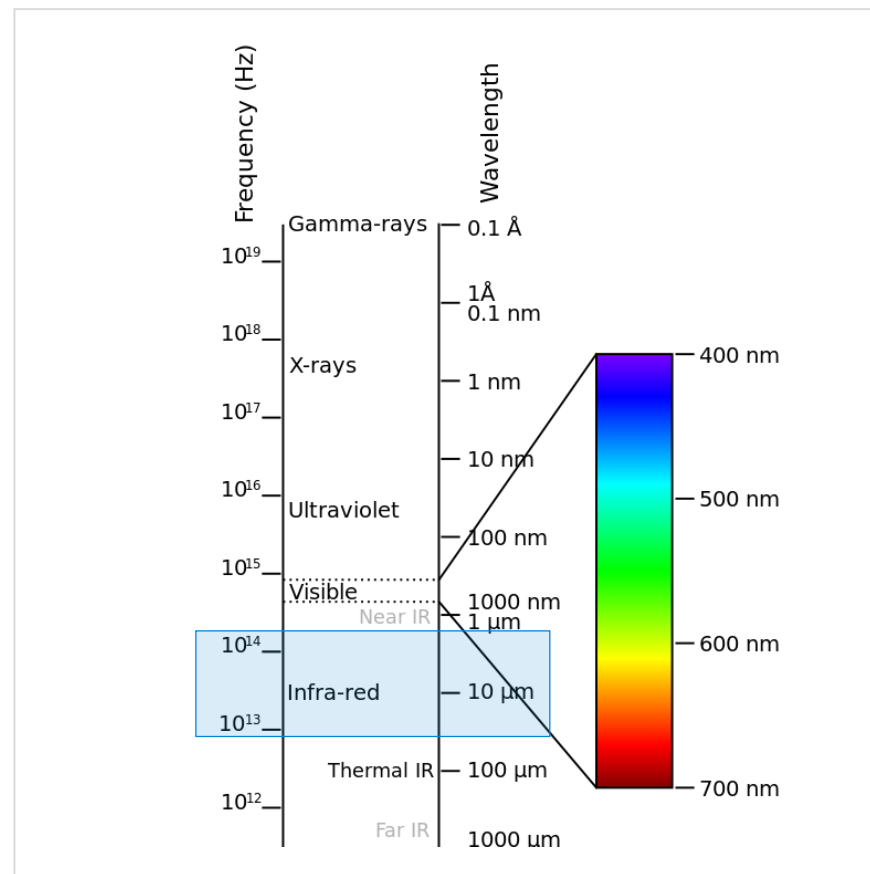
## 概要

赤外線は可視光線と比べて波長が長く、周波数が低いです。

赤外線スペクトルは、近赤外、中赤外、遠赤外の放射領域に分けられます。最も使用頻度の高い領域は、中赤外 (周波数:  $4,000 \sim 400 \text{ cm}^{-1}$ ) です。

フーリエ変換赤外分光光度計 (FTIR) は、固体、液体、気体の吸光、発光、光伝導、ラマン散乱の赤外線スペクトルを取得する技術です。

FTIR 分光光度計は、広いスペクトル範囲で高スペクトル分解能データを同時に取得します。



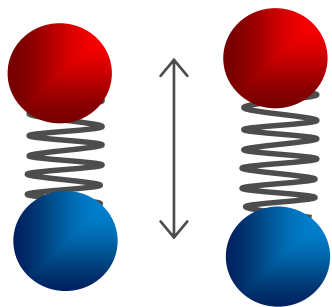
Victor Blacus による「電磁スペクトル」

出典: [Wikipedia](https://en.wikipedia.org/wiki/Electromagnetic_spectrum)

# フーリエ変換赤外分光光度計

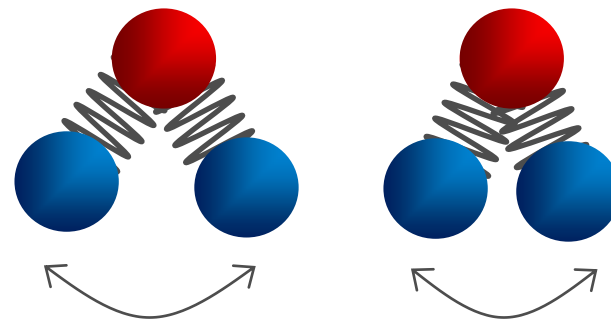
## 概要

赤外線吸収によって、分子振動が発生します。  
赤外分光光度計は、この振幅の変化を測定します。



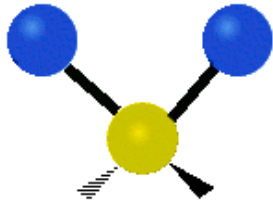
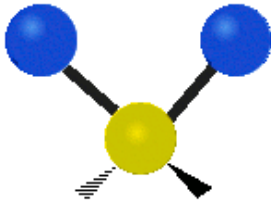
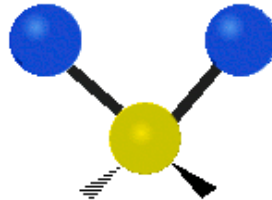
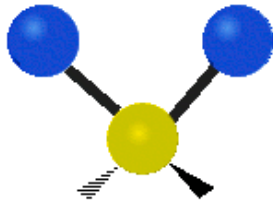
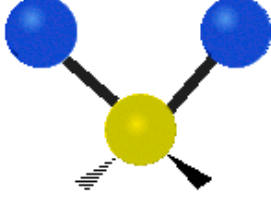
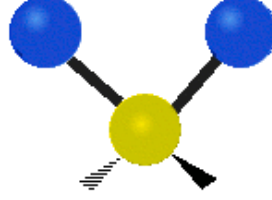
$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$





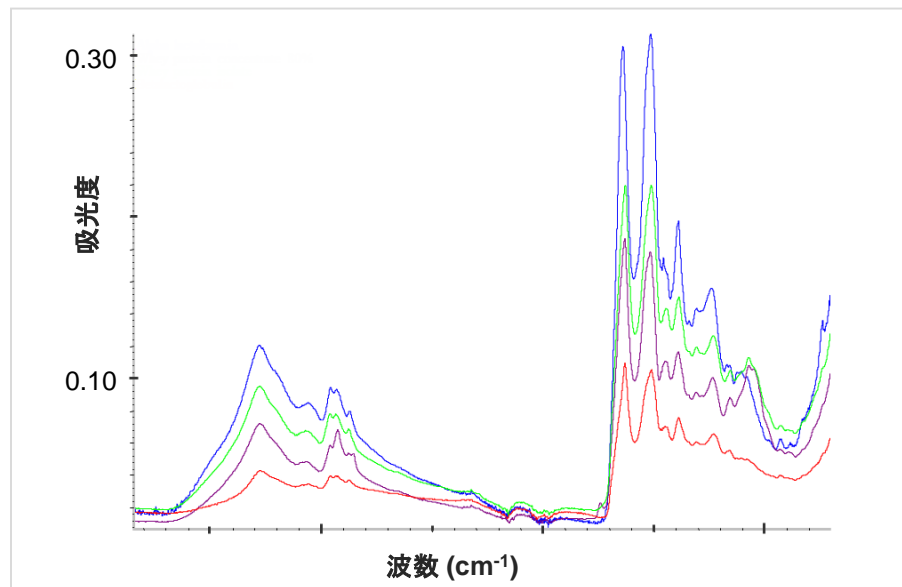
# フーリエ変換赤外分光光度計 概要

対称伸縮	逆対称伸縮	はさみ
		
横揺れ	縦揺れ	ねじれ
		

# フーリエ変換赤外分光光度計

## 概要

- 赤外 (IR) 活性のある結合によってピークが形成される
- これらの結合は、特定の周波数で振動する
- ピーク位置とピーク高の小さな差異によって区別できる
- IR スペクトルは化合物の指紋として使用できる



IR



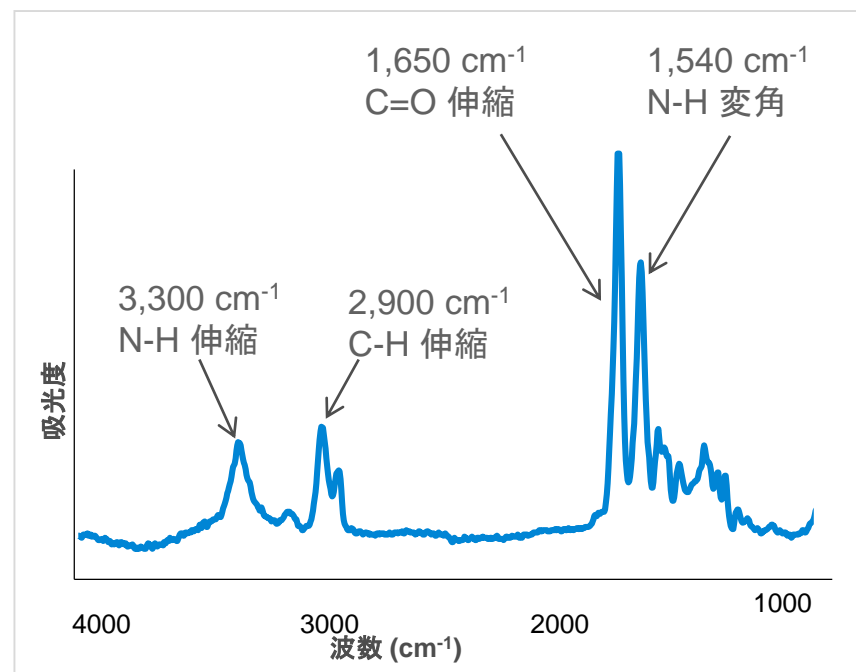
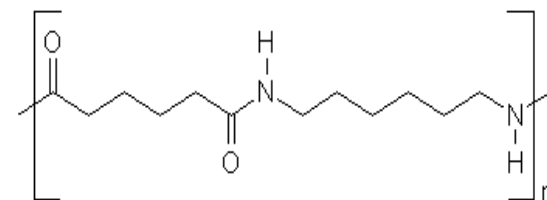
# フーリエ変換赤外分光光度計

## 概要

さまざまな結合 (通常は「官能基」と呼ばれます) が吸収する波数によって結合強度がわかります。

結合が強いほど、波数が高くなります。

すべての官能基は各々に特有な周波数で吸収するため、赤外線スペクトルから測定試料の化学構造を解明できます。



# フーリエ変換赤外分光光度計

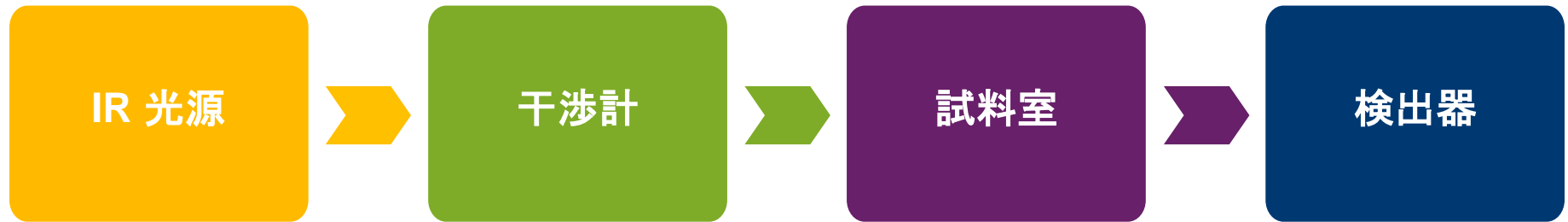
## 概要

### 分子結合と波長

結合	振動の種類	波数範囲 (cm <sup>-1</sup> )
C-H	アルカン -CH <sub>3</sub> (伸縮) (変角) -CH <sub>2</sub> (変角)	3,000 ~ 2,850 1,450 & 1,375 1,465
	アルケン 伸縮 (面外変角)	3,100 ~ 3,000 1,000 ~ 650
	芳香族 (伸縮) (面外変角)	3,150 ~ 3,050 900 ~ 600
	アルキン (伸縮)	~ 3,300
	アルデヒド	2,900 ~ 2,700
C=C	アルケン 芳香族	1,680 ~ 1,600 1,600 & 1,475
C≡C	アルキン	2,250 ~ 2,100
C=O	アルデヒド ケトン カルボン酸 エステル アミド 無水物	1,740 ~ 1,720 1,725 ~ 1,705 1,725 ~ 1,700 1,750 ~ 1,730 1,680 ~ 1,630 1,810 ~ 1,760

結合	振動の種類	波数範囲 (cm <sup>-1</sup> )
C-O	アルコール、エステル、 エーテル、カルボン酸、 無水物	1,300 ~ 1,000
O-H	アルコール、フェノール 遊離 H 結合 カルボン酸	3,650 ~ 3,600 3,400 ~ 3,200 3,400 ~ 2,400
N-H	第一級および第二級 アミン & アミド (伸縮) (結合)	3,500 ~ 3,100 1,640 ~ 1,550
C-N C=N	アミン イミンとオキシム	1,350 ~ 1,000 1,690 ~ 1,640

# フーリエ変換赤外分光光度計 構成の概要



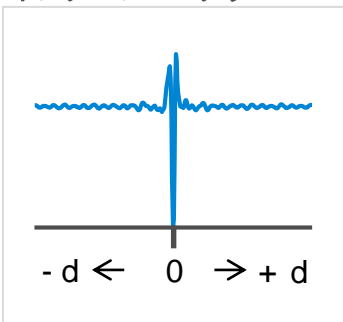
- IR 光源で赤外線が生成される (広帯域光源)
- 干渉計 (ミラーで構成) によって干渉パターンが作られる
- 試料室でサンプルを保持し、赤外線がサンプルを通過する
- 検出器がインターフェログラムを取得する
- コンピュータがインターフェログラムをスペクトルに変換する

# フーリエ変換赤外分光光度計 インターフェログラム

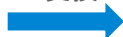
インターフェログラムは、移動ミラーの位置に対する赤外線強度のプロットです。

フーリエ変換アルゴリズムが個々の吸収周波数を分離し、強度と波数のプロットを作成してインターフェログラムをスペクトルに変換します。

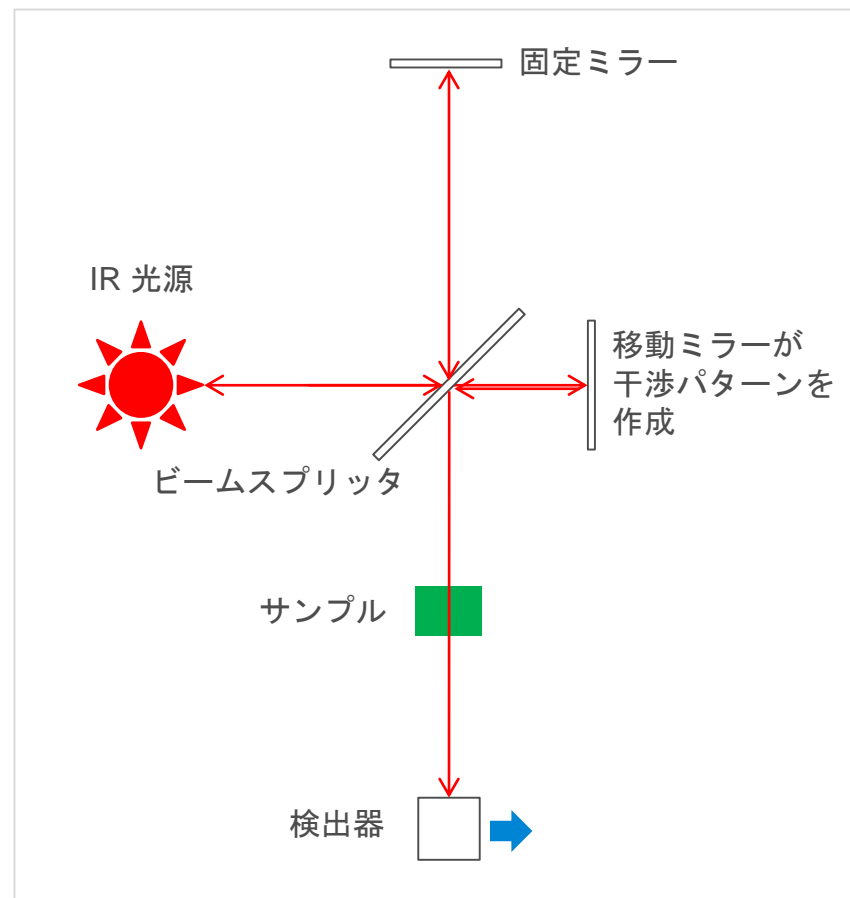
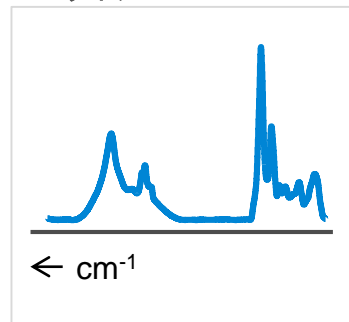
インターフェログラム



フーリエ  
変換



スペクトル

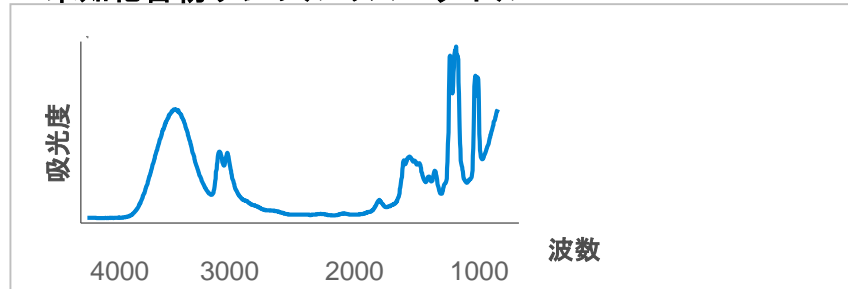


# フーリエ変換赤外分光光度計

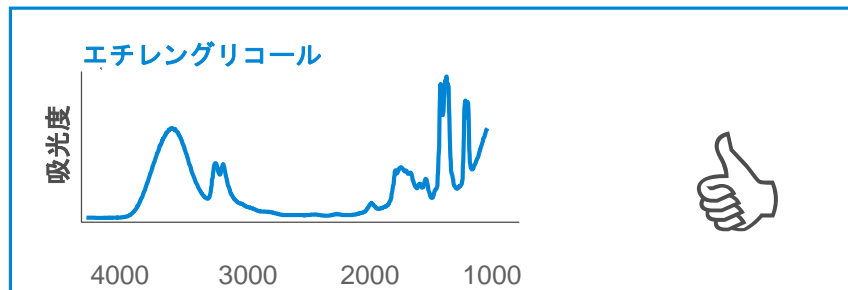
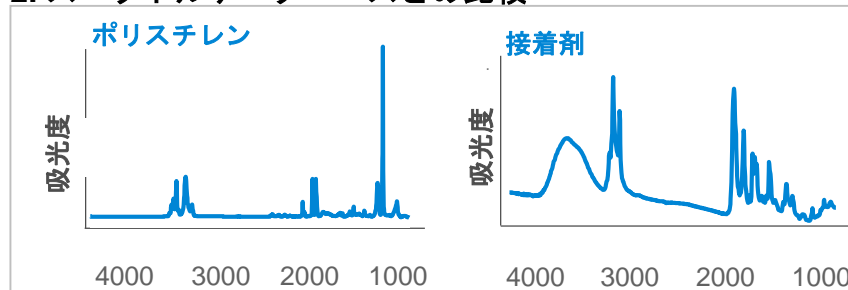
## 定性分析

- 化合物はそれらに特有の赤外線スペクトルで同定できる
- 赤外線スペクトルによって、分子構造を把握できる (シアノ基の存在など)
- コンピュータで赤外線データベースを検索し、化合物を同定できる

## 1. 未知化合物サンプルのスペクトル



## 2. スペクトルデータベースとの比較

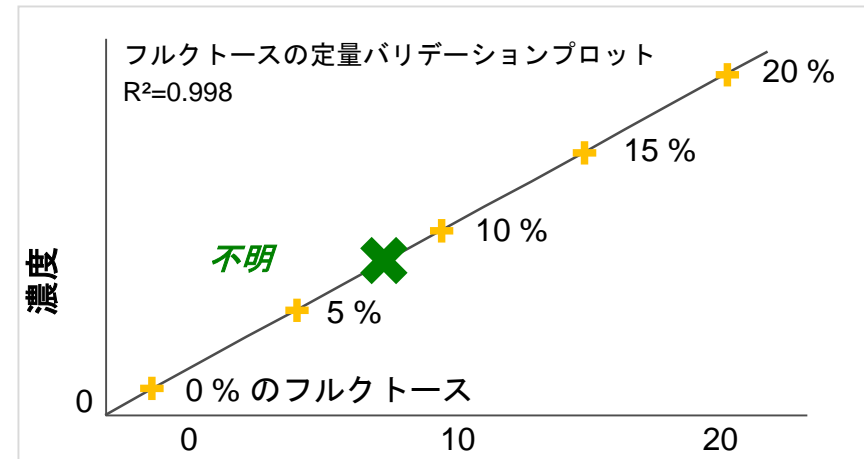
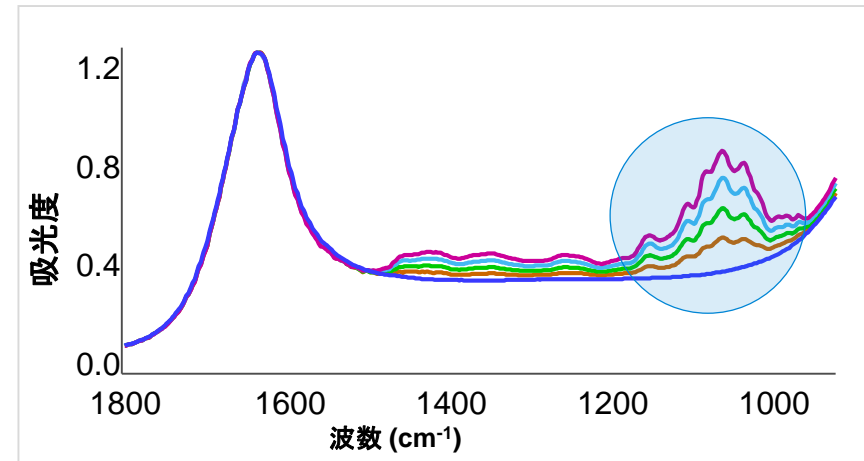


# フーリエ変換赤外分光光度計

## 定量分析

### 定量

- Beer-Lambert の法則は、FTIR 分光光度計に適用できる
- 吸光度と標準溶液の濃度の検量線を用いてサンプルを比較する
- 混合物に適用可能 - 同時定量



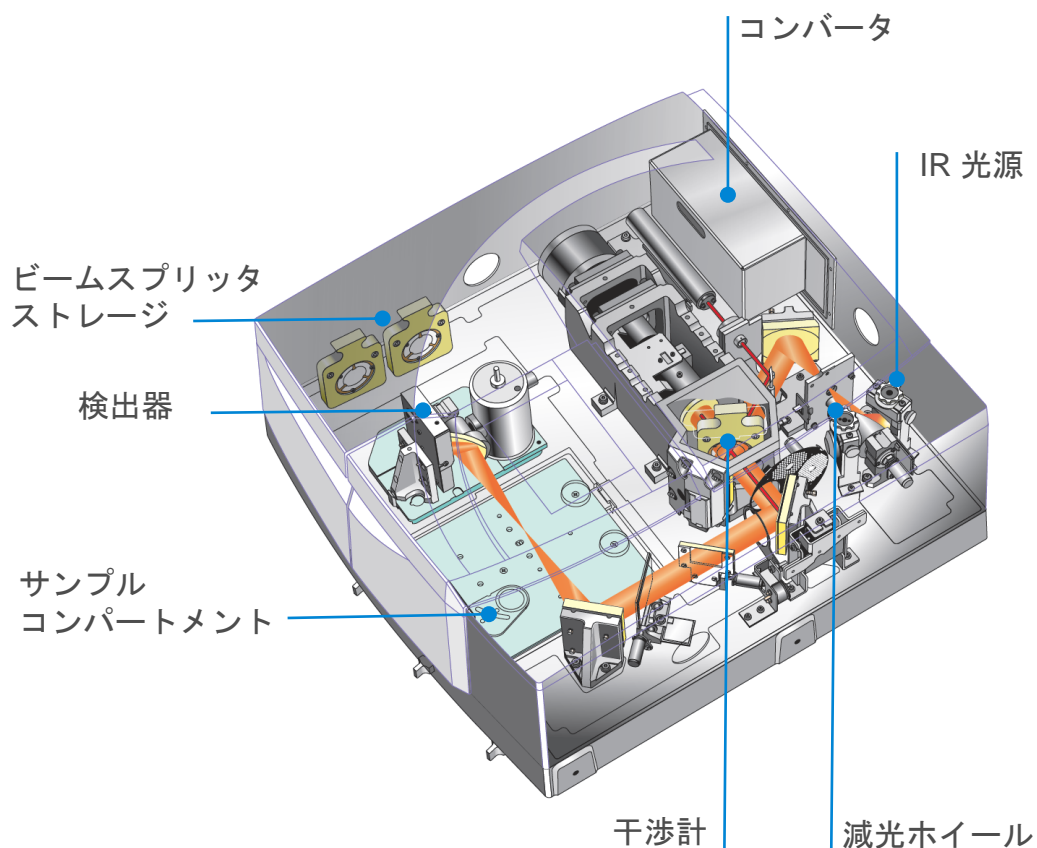
出典: アジレント社内用トレーニング資料



# フーリエ変換赤外分光光度計システム

## 主な用途

- バイオメディカルイメージング  
(組織)
- ケミカルイメージング測定
- プロセス管理  
(バイオディーゼル)
- ポリマー/材料研究/管理
- 法医学用途  
(血中アルコール成分)



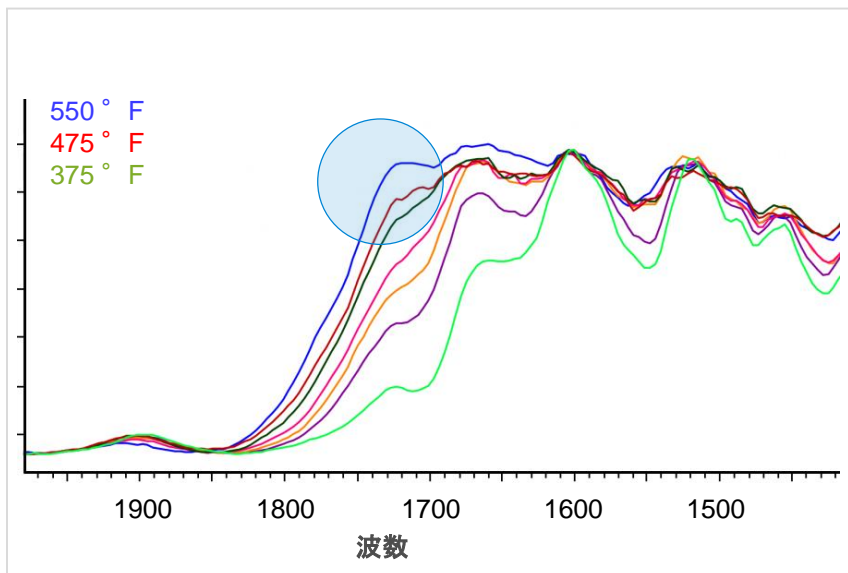
# フーリエ変換赤外分光光度計 用途

市場	用途
材料	<ul style="list-style-type: none"><li>熱や紫外線による複合材料へのダメージ、複合材料の硬化</li><li>表面コーティングの同定、表面の清浄度と前処理、コーティングの摩耗、および風化</li><li>品質管理、芸術および歴史に関する保存、材料研究</li></ul>
エネルギーと化学	<ul style="list-style-type: none"><li>受入れ液体原材料と最終製品 (有機化学物質、界面活性剤、潤滑油、食用油など) の品質管理</li></ul>
食品	<ul style="list-style-type: none"><li>受入れ原材料と最終製品の品質管理</li></ul>

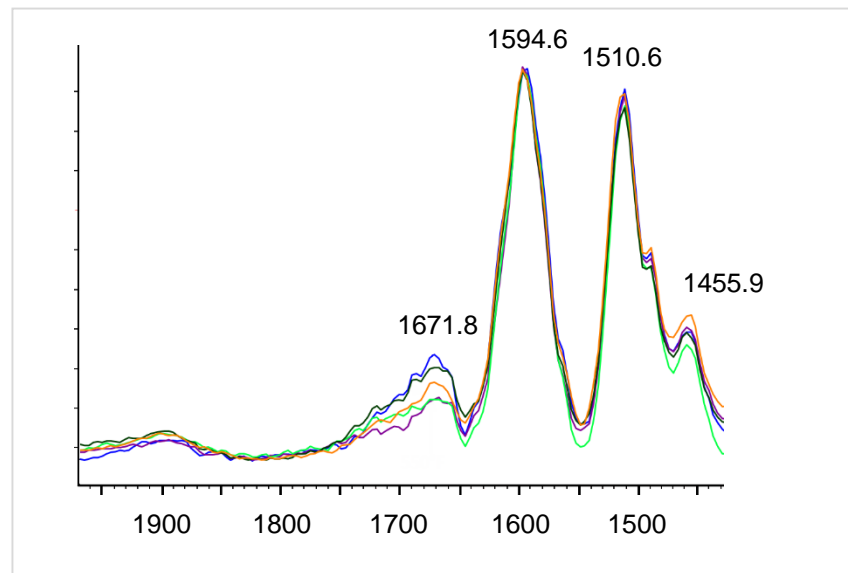


# フーリエ変換赤外分光光度計

## ダメージを受けた複合材料の測定



熱によるダメージを受けたエポキシ 1 処理されていないテープの複合材料。複合材料の試験片は一定の温度範囲に 1 時間曝露されています。1,722  $\text{cm}^{-1}$  の吸収バンド(青い丸)は、樹脂の酸化によるカルボニル伸縮振動に由来し、温度の過剰曝露を示しています。



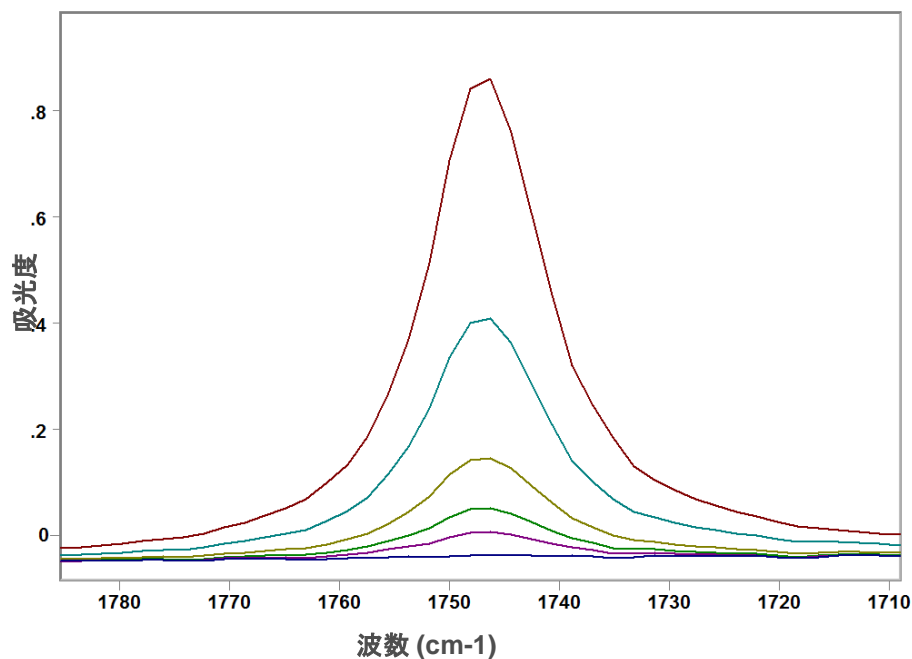
熱によるダメージを受けたエポキシ 1 処理されたテープの複合材料。複合材料の試験片は一定の温度範囲に 1 時間曝露されています。1,722  $\text{cm}^{-1}$  の振動は、嫌気性環境では見られません。

1,672  $\text{cm}^{-1}$  における吸光度の減少は温度曝露と逆相関です。

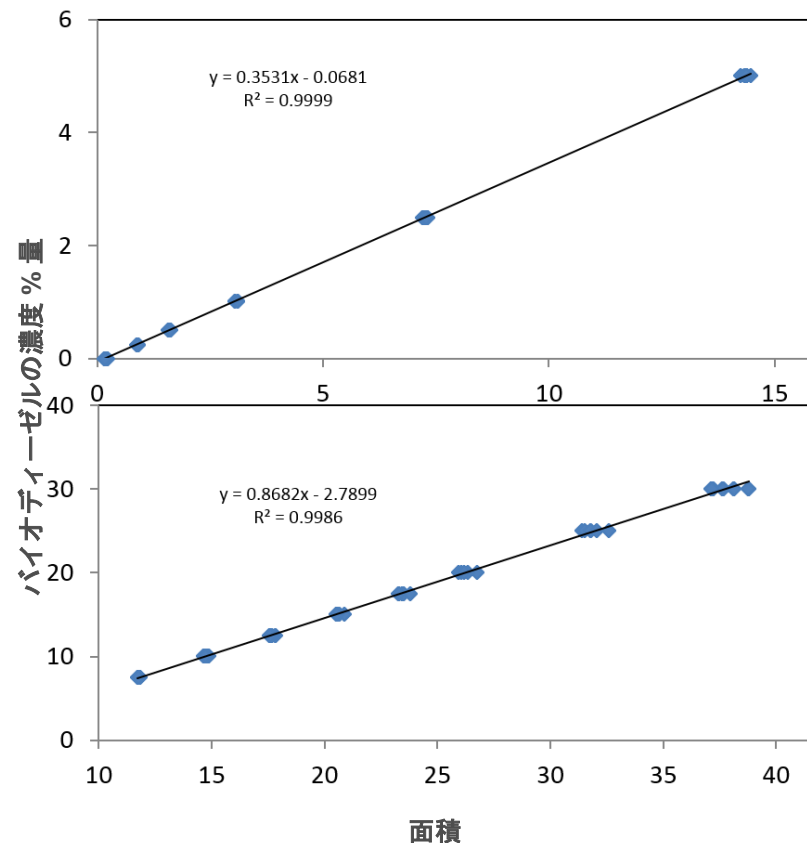
出典: [Non-Destructive Evaluation of Composite Thermal Damage with Agilent's New Handheld 4300 FTIR](#)

# フーリエ変換赤外分光光度計

## 高セタン価ディーゼル燃料中の バイオディーゼル濃度の測定



バイオディーゼル濃度 (0 ~ 6 %) における高セタン価ディーゼル燃料 (吸収領域 1,713 ~ 1,784 cm<sup>-1</sup>) の赤外線スペクトルの重ね表示 (左) と各濃度における検量線 (右)



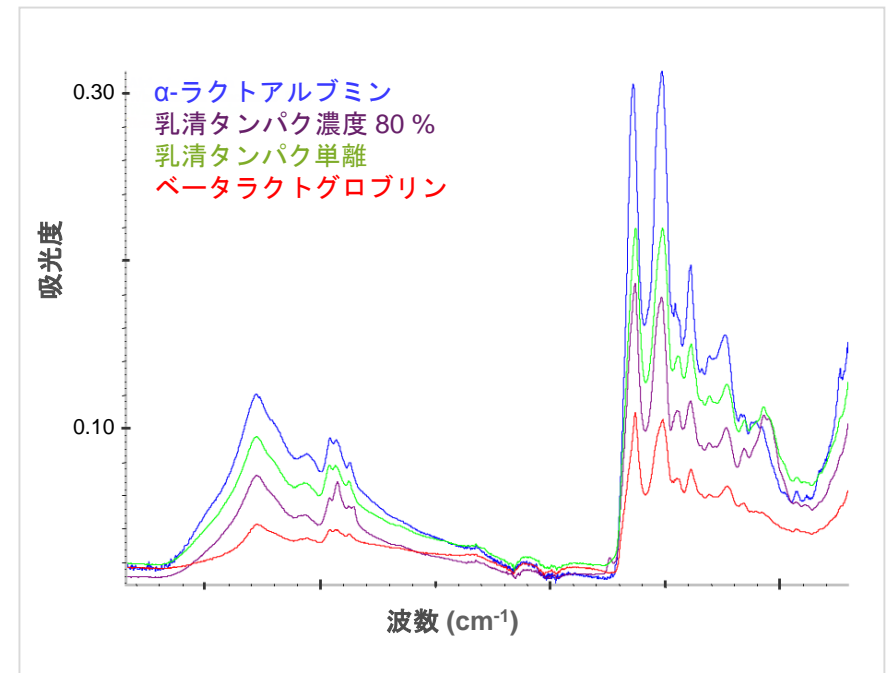
出典: [ASTM D7806-12 for Biodiesel in Petroleum-based Diesel Fuel Oil](#)

# フーリエ変換赤外分光光度計

## 粉末乳製品の品質管理

### スペクトル採取の方法:

- ダイヤモンド ATR 表面に少量のタンパク質の粉末を置く
- 付属の圧力クランプで、ダイヤモンド結晶にサンプルを密着させる  
(クランプのスリップクラッチにより締め過ぎを防止)
- $4,000 \sim 650 \text{ cm}^{-1}$ 、64 回積算でスペクトルを収集  
( $4 \text{ cm}^{-1}$  の分解能で測定時間は 約30 秒)



Cary 630 FTIR-ATR ユニットで測定した乳製品粉末の赤外スペクトル

出典: [QA/QC of dairy powders using the Agilent Cary 630 ATR-FTIR analyzer](#)

# フーリエ変換赤外分光光度計

## ポテトチップス中のアクリルアミドの測定

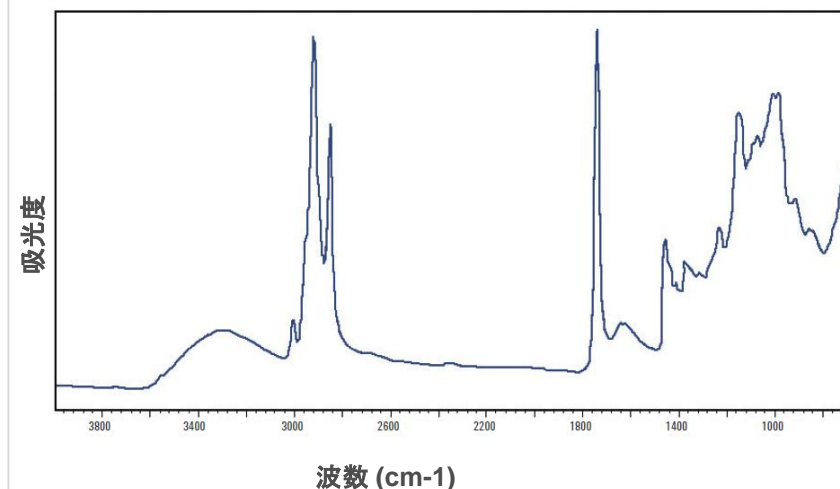
Sensor	Potato Chip Type		Factors	SE (µg/L)	r
Portable Cary 630 MIR	<sup>a</sup> Regular	Calibration	7	65	0.95
		Cross Val.	7	74	0.93
		Prediction*	7	75	0.90
	<sup>b</sup> Seasoned	Calibration	7	59	0.96
		Cross Val.	7	75	0.92
	<sup>c</sup> Sweet	Calibration	7	74	0.99
		Cross Val.	7	98	0.98

<sup>a</sup> "Regular" refers to potato chips containing only potatoes, vegetable oils and salt.

<sup>b</sup> "Seasoned" refers to potato chips containing additional ingredients.

<sup>c</sup> "Sweet" refers to sweet-potato chips.

\* independent variable predictions made on regular potato chips only



標準的なポテトチップスの結果とスペクトル

シングル反射ダイヤモンドATR サンプル技術を搭載した可搬型 FTIR アナライザで測定

出典: [Molecular Spectroscopy Compendium - Ensure food quality, production, and safety](#)

# フーリエ変換赤外分光光度計 性能

赤外分光光度計は、気体、液体、固定の分析に使用できる優れた汎用的な技術です。

赤外分光光度計は、構造の同定に使用される場合もあります。官能基によって、強度と位置 (周波数) に関する特性帯域を有するためです。

研究から産業まで幅広く使用されている簡便で信頼性の高い技術です。

## 蛍光分光光度計

### 利点

- 操作が簡単
- 高速で正確な分析
- さまざまな種類やサイズのサンプルを処理できる
- 定性、定量のどちらにも使用できる
- サンプル前処理法がほぼまたは完全に不要な場合がある
- 非破壊的

### 短所

- 分子が赤外線に反応する必要がある
- 元素情報が最小限である



# 省略記号・略語

省略記号・略語	定義
A	吸光度
b	光路長 (cm)
c	光の速度 ( $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ )
$\epsilon$	吸光係数またはモル吸光係数 ( $\text{l mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$ )
E	振動電場
$E$	エネルギー
FTIR	フーリエ変換赤外
h	プランク定数 ( $6.62 \times 10^{-34} \text{ Js}$ )
I	透過放射線
$I_0$	入射放射線
$\lambda$	波長
T	透過率
UV-Vis	紫外可視
$\nu$	周波数 ( $\text{s}^{-1}$ )





# 詳細情報

アジレント製品の詳細については、[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp) をご覧ください。

本プレゼンテーションに関するご質問やご提案は、[academia.team@agilent.com](mailto:academia.team@agilent.com) までお問い合わせください。

文献	タイトル (日本で表示していないものはすべて英文です)	資料番号
Early history	“The Early History of Spectroscopy” by Nicholas C. Thomas, <i>J Chem Edu</i> , Vol 68, 6, August 1991	
Primer	<a href="#">Fundamentals of UV-visible spectroscopy</a>	5980-1397EN
Application	<a href="#">Measuring optical densities over 10 Abs on the Agilent Cary 7000 Universal Measurement Spectrophotometer (UMS)</a>	5991-2528EN
Application	<a href="#">Measuring the color of a paint on canvas directly with external diffuse reflectance using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer</a>	5991-3783EN
Application	<a href="#">Cary 60 UV-Vis 分光光度計と光ファイバーによる発色種の光触媒特性の簡単な自動測定</a>	5990-7864JAJP
Application	<a href="#">グリーン蛍光タンパク質 (GFP) の細胞質発現および出芽酵母中の誘導体 :Agilent Cary Eclipse を用いた生体分析</a>	SI-A-1831JAJP
Application	<a href="#">Quantification of complex polycyclic aromatic hydrocarbons or petroleum oils in water with Cary eclipse fluorescence spectrophotometer according to astm d 5412-93 (2000)</a>	5991-3166EN
Application	<a href="#">Non-Destructive Evaluation of Composite Thermal Damage with Agilent's New Handheld 4300 FTIR</a>	5991-4037EN
Application	<a href="#">ASTM D7806-12 標準試験法による石油系ディーゼル燃料油中のバイオディーゼル含有量の測定</a>	5991-5591JAJP
Application	<a href="#">Agilent Cary 630 FTIR ダイヤモンド ATRアタッチメントを用いた粉乳の QA/QC</a>	5991-0784JAJP
Application	<a href="#">Molecular Spectroscopy Compendium - Ensure food quality, production, and safety</a>	5991-3818EN
Web	<a href="#">CHROMacademy</a> – free access for students and university staff to online courses	
Videos & Images	<a href="http://www.agilent.com/chem/teachingresources">www.agilent.com/chem/teachingresources</a>	





# THANK YOU

Publication number: 5991-6592JAJP

◀ 目次

教育目的専用  
March 14, 2016

50



Agilent Technologies

ACADEMIC  
& INSTITUTIONAL  
RESEARCH