

# プローブ型ラマンで広がる 現場分析の可能性

“低分子試料の“その場識別を、もっとシンプルに”  
**Expanding On-site Analysis with Probe-based Raman Spectroscopy**

食品・医薬・化学分野における代表的な低分子試料を対象として、プローブ型ラマン装置によりスペクトルを取得し、その識別性・再現性を検証する。

## 【装置の主な仕様】



Probe Raman	主な仕様
測定可能領域 ( $\text{cm}^{-1}$ )	270~2400 -421~1709 <sup>(1)</sup>
サイズ (cm)	29.7 × 21.0 × 8.7
重量 (kg)	約5
レーザー波長 (nm)	785
波数分解能 ( $\text{cm}^{-1}$ )	6 (平均)
レーザー出力 (mW)	500 (最大)

備考

(1) 励起レーザー波長830nm搭載の低波数モジュールを使って測定した場合の値。但し、レイリー散乱付近は測定不可。(0 $\text{cm}^{-1}$ )付近仕様は予告なく変更する場合がございます。

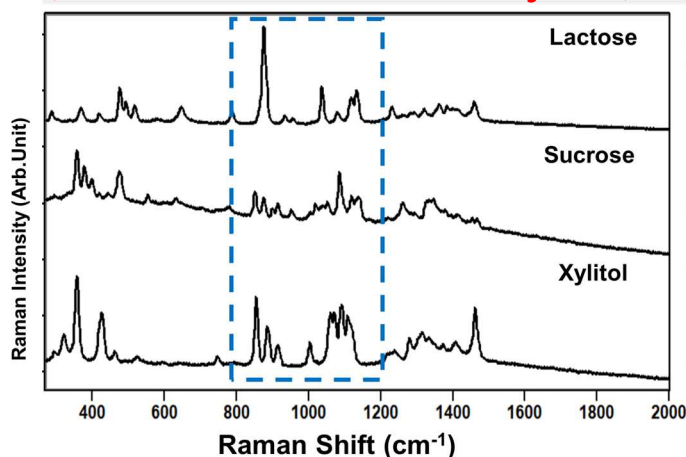
## 【プローブの外観と仕様】



プローブ本体 材質	SUS 316 (ステンレス)
レンズ材質	光学グレード 石英
プローブ長さ	約 20 cm
プローブ外径	1/2 インチ
ファイバー径	100 $\mu$ (レーザー側) 200 $\mu$ (コレクション)
ファイバー長さ	約 2 m

# 代表的スペクトルとピークの特徴

## 食品甘味料系 (Lactose / Sucrose / Xylitol)

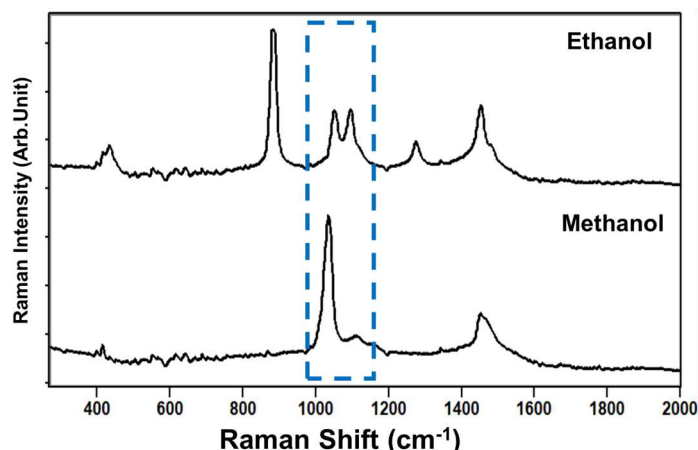


- 分子構造に由来するC-O-C伸縮振動(800-1200 cm<sup>-1</sup>)領域が明瞭に観察されます。
- 各糖類の異なる結合環構造により、指紋領域のピークパターンが顕著に異なります。

### 【引用】

- Colthup, N.B. et al. 'Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy', 3rd Ed.
- Socrates, G. 'Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies', Wiley.

## 有機溶媒系 (エタノール, メタノール)

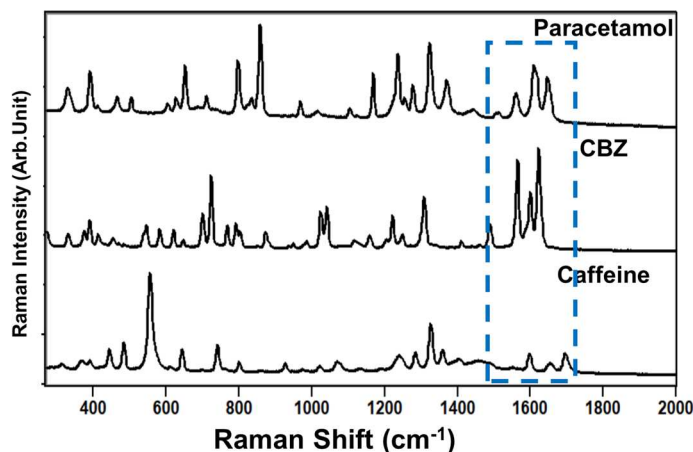


- メタノールとエタノールは1000-1100 cm<sup>-1</sup>のピーク位置差で識別可能。
- プロセス中の混合溶媒管理や異物チェックに応用可能。

### 【引用】

- SDBS (<https://sdb.sdb.aist.go.jp/>)
- SpectraBase (<https://spectrabase.com/>)

## 医薬品原薬系 (APAP, CBZ, カフェイン)



- Acetaminophen (APAP) はベンゼン環C=C伸縮(～1600 cm<sup>-1</sup>)を持つ。<sup>(1)</sup>
- CBZ特有のピーク(473, 750, 1160, 1590 cm<sup>-1</sup>)が良好に分離され、原薬識別に有効。<sup>(2)</sup>
- CaffeineはC-NおよびN-CH<sub>3</sub>伸縮・曲げ振動が明瞭に分離。<sup>(3)</sup>

## 試料構成の分類とスペクトル傾向

区分	主な試料	分類	ラマンピーク傾向
医薬品原薬	アセトアミノフェン CBZ カフェイン	高分子性 有機化合物	芳香環・アミドに由来する 1500 cm <sup>-1</sup> 超のピークが多数
添加剤 (食品・製剤)	乳糖 キシリトール スクロース	多価 アルコール系 糖類	C-O振動主体で 1200 cm <sup>-1</sup> 以下にピークが集中
有機溶媒	エタノール メタノール	低分子・ 揮発性液体	OH・C-O振動中心で 1000-1100 cm <sup>-1</sup> 前後に 限定的なピーク

### 【引用】

- (1)APAP: Al-Zoubi, N., Koundourellis, J. E., & Malamataris, S. (2002). FT-IR and Raman spectroscopic methods for identification and quantitation of orthorhombic and monoclinic paracetamol in powder mixes. Journal of pharmaceutical and biomedical analysis, 29(3), 459-467.
- (2)CBZ: Farias, M., & Carneiro, R. (2014). Simultaneous quantification of three polymorphic forms of carbamazepine in the presence of excipients using Raman spectroscopy. Molecules, 19(9), 14128-14138.
- (3)Caffeine: Hédoux, A., Decroix, A. A., Guinet, Y., Paccou, L., Derollez, P., & Descamps, M. (2011). Low- and high-frequency Raman investigations on caffeine: polymorphism, disorder and phase transformation. The Journal of Physical Chemistry B, 115(19), 5746-5753.

### 【まとめ】

各試料において明瞭なスペクトルが取得され、分子構造に基づくピーク差異が確認された。用途に応じた識別・品質管理に応用可能であることが示唆された。

モデル製剤の準備やスペクトル測定のご支援をいただきました明治薬科大学 分子製剤研究室の深水教授と学生諸君に深謝いたします。