

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】



【プローブの外観と仕様】



Probe Raman 主な仕様

測定可能領域
(cm⁻¹) 270～2400
-421～1709⁽¹⁾

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
(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。(0cm⁻¹)付近仕様は予告なく変更する場合がございます。

プローブ本体 SUS 316
材質 (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

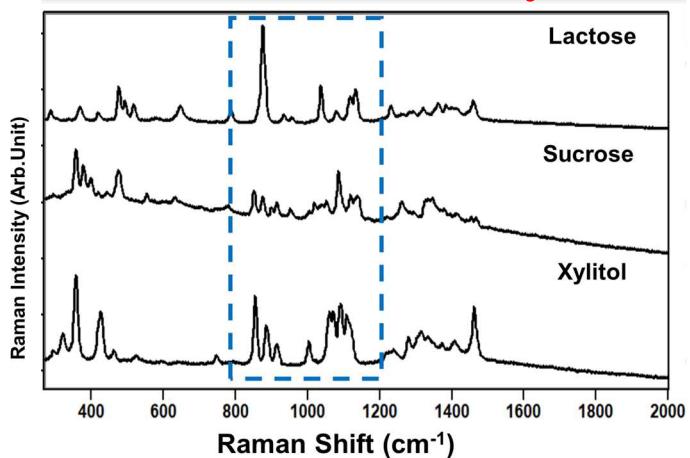
プローブ外径 1/2 インチ

ファイバー径 100 μ (レーザー側)
200 μ (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)

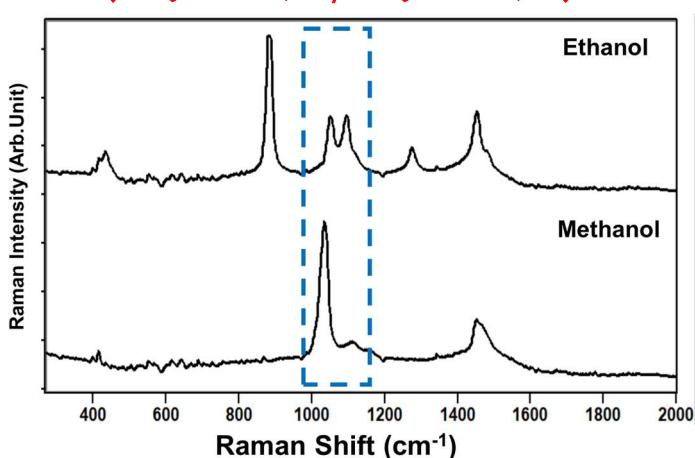


- 分子構造に由来するC-O-C伸縮振動(800–1200 cm⁻¹)領域が明瞭に観察されます。
- 各糖類の異なる結合環構造により、指紋領域のピークパターンが顕著に異なります。

【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)

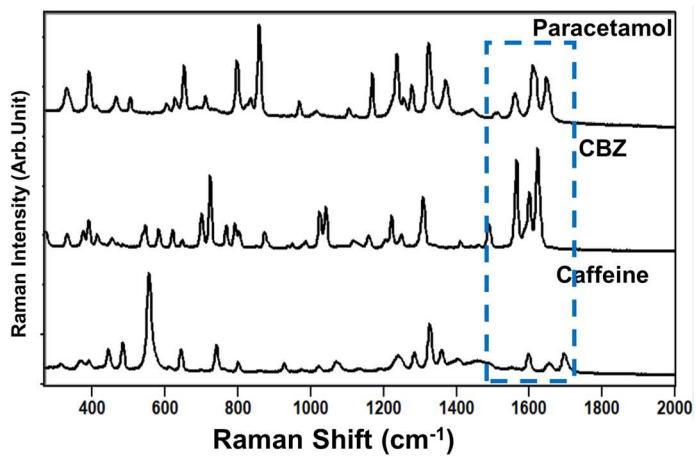


- メタノールとエタノールは1000–1100 cm⁻¹のピーク位置差で識別可能。
- プロセス中の混合溶媒管理や異物チェックに応用可能。

【引用】

• SDBS (<https://sdbs.db.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⁻¹)を持つ。⁽¹⁾
- CBZ特有のピーク(473, 750, 1160, 1590 cm⁻¹)が良好に分離され、原薬識別に有効。⁽²⁾
- CaffeineはC-NおよびN-CH₃伸縮・曲げ振動が明瞭に分離。⁽³⁾

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 來する 1500 cm ⁻¹ 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 ⁻¹ 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 ⁻¹ 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)Caffein: 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。