

WiRE™ ソフトウェア: スペクトラムサーチ



化合物と混合物の識別

未知の物質の同定は、ラマン分光の主用途のひとつです。同定には、スペクトルライブラリを利用するのが通例です。スペクトラムサーチ搭載のレニショー WiRE ソフトウェアは、特定用途向けのスペクトルライブラリにアクセスできるとともに、さまざまな市販のスペクトルライブラリもサポートしており、次のことができます。

- 物質の同定
- 完全自動処理による、混合物中の無数の成分の同定
- 「主要」成分除去後の残留スペクトルからの混合物の同定
- スペクトル領域の手動非表示化による、未知のラマンバンドへの同定対象の絞り込み
- ユーザー自身の用途に特化した独自のカスタムライブラリの作成

混合物の組成物の同定

混合物のスペクトルに対して従来のスペクトルライブラリ検索を実行しても、信頼できる結果が得られないことは少なくありません。良好に一致するスペクトルがライブラリ内にひとつも存在しないからです。そのため、最初にヒットしたスペクトルを取り除いた残留スペクトルを手動で再検索するというのが、混合物を分析する方法のひとつです。この方法は、場合によっては効果的ですが、ユーザーの入力負担が大きい上に、主観に左右される可能性があります。WiRE には、混合物中に存在し得る成分の最大数を定義するだけでこの処理を自動化できるオプションがあります。WiRE は、サンプルの潜在的組成物をユーザーに提示し、複数のライブラリを同時に使用して同定を実行できるため、分析が 1 回で済みます。

例: 薬錠の分析

当社にて、inVia™ コンフォーカルラマンマイクロスコプである薬錠を分析しました。inVia の仕様は 785nm 励起レーザーと、複数の成分の混合スペクトルを得るために低倍率対物レンズを使用しました。

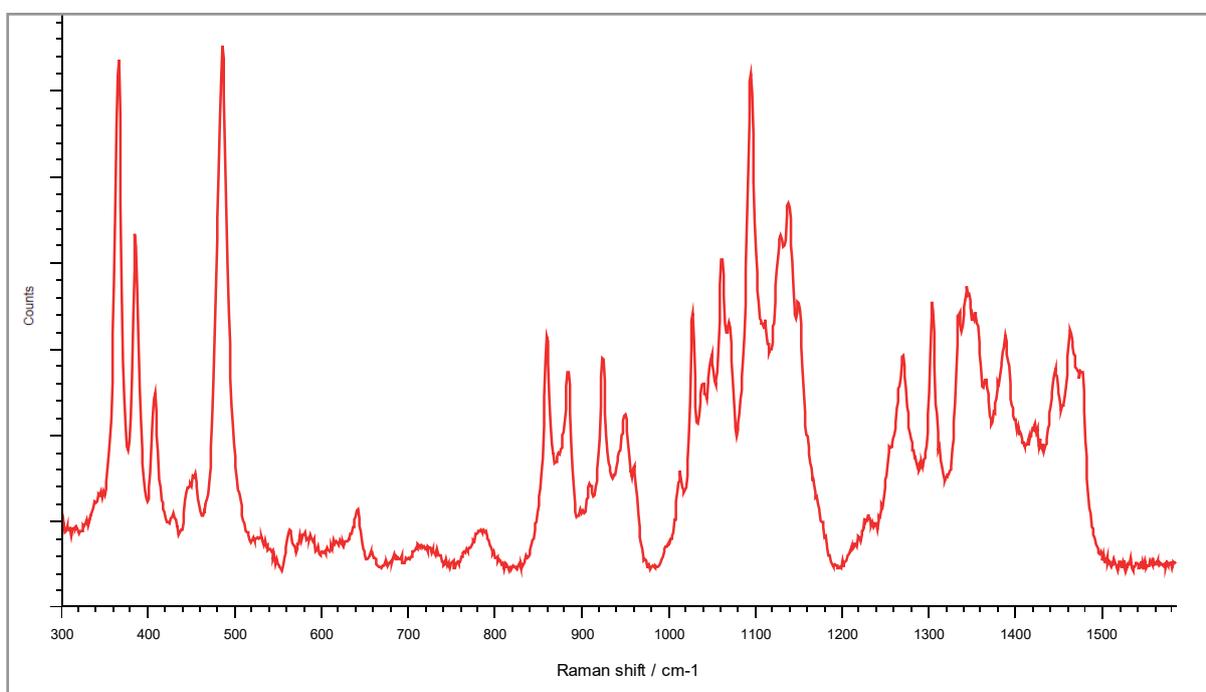


図 1: 低空間分解能の薬錠分析から得られた未知の物質の混合スペクトル

スペクトル分析に使用したのは、最大 3 成分を定義した自動検索です。

最も良好に一致したのは、ラクトース水和物、トウモロコシ澱粉、ステアリン酸マグネシウムでした (図 2)。その他の一致も、ラクトース水和物とトウモロコシ澱粉の組合せでしたが、残りの成分が、ステアリン酸またはフマル酸ステアリルナトリウムでした。したがって、ラクトース水和物とトウモロコシ澱粉が、ステアリン関連成分 (自動検索による結果から、ステアリン酸マグネシウムである可能性が高い) と共に存在することは間違いありません。

図 2 は、最良一致の成分に分解されたスペクトルも示しています。

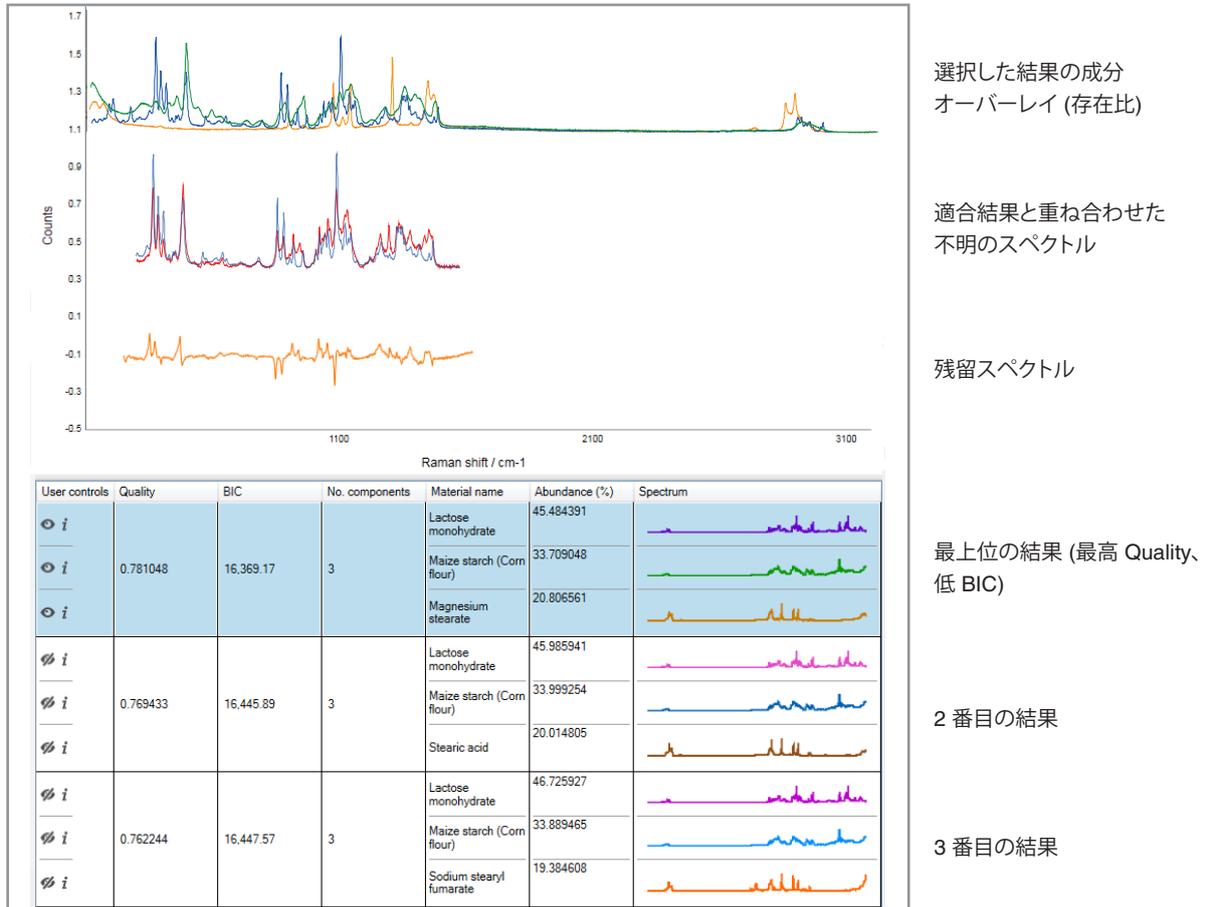


図 2: 製薬用スペクトルの分析

- 「Quality」は、適合する結果と未知のスペクトル間の一致度を表します。
- ベイズ情報量基準 (BIC) は、組成物をわかりやすく説明している結果に対して低い値を付ける適合度指標です。
- Abundance は、各ライブラリスペクトルに含まれる未知のスペクトルの割合を表します。

「Quality」の増加と BIC の減少という組合せ (図 2 の最上位グループ) が、最も信頼度の高い結果です。

この方法の利点のひとつは、検出できる成分の数を制限しないということです。また、これらの指標により、結果を明確に比較できるため、最適な材料を判断するのに便利です。

レニショーの補完ツールとライブラリ検索の併用

独自のライブラリを簡単に構築できます。

ライブラリ検索結果の質は、ライブラリの内容に左右されます。レニショーでは、高品質の汎用ライブラリや用途別ライブラリを幅広く提供していますが、場合によって、対象物質の独自ライブラリを構築する必要があります。

レニショーの Library Manager を使えば、ライブラリを簡単に構築できます。空のライブラリを新たに生成して名前を付け、スペクトルを個別に、またはグループにして加えていくだけで、ライブラリを作成できます。一度ライブラリを作成したら、1 回のマウスクリックでスペクトルを増やしていきます。設定は一切不要です。自身のライブラリを市販のライブラリと組み合わせることで、最も包括的な物質同定手段になることも少なくありません。

Intelligent Fitting のベースライン除去によるデータの最適化

ライブラリ検索アルゴリズムには、スペクトルのベースラインの変動に対処するさまざまな方法が備わっていますが、前処理によってベースラインを除去すると、良好な結果が得られることが少なくありません。

レニショーの Intelligent Fitting は、サンプル蛍光によって作成できるブロードなバックグラウンドを自動的にターゲットにします。シャープでもブロードでもあるラマンバンドには触れないため、ライブラリ検索に最適な高品質のスペクトルが得られます。

最高品質のデータが得られる WiRE には、Intelligent Fitting 以外にも多数の処理ツールが備わっています。

注: スペクトラムサーチは、WiRE のオプションです。混合物分析ができるのは、WiRE 5.3 以上です。

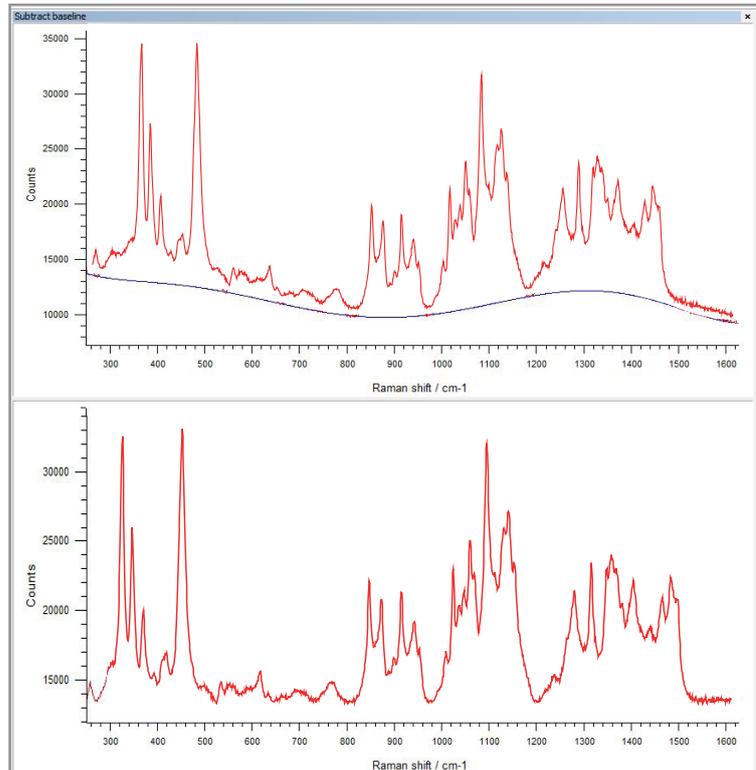


図 3: ワンクリックで Intelligent Fitting のベースラインを除去した例 (上: インテリジェントベースラインを青色で示した元のスペクトル, 下: ベースラインを除去した結果)

レニショー: ラマンのイノベータ

レニショーは、高速化学イメージングテクノロジーを搭載したコンフォーカルラマンマイクロスコプ、専門分析装置、走査型電子顕微鏡および原子間力顕微鏡用インターフェース、分光用固体レーザー、そして最先端冷却 CCD 検出器などさまざまな高性能分光関連製品を製造しています。

広範な領域と用途において最高レベルのパフォーマンス、感度、そして信頼性を提供するレニショーの製品は、お客様のニーズに合わせて設計されているため、非常に難しい分析でも自信を持って行っていただけます。

世界各国のレニショー現地法人および販売代理店のネットワークを通して、優れたサービスとサポートをお客様に提供いたします。

詳細については、www.renishaw.jp/raman をご覧ください。

レニショーでは、本書作成にあたり、細心の注意を払っておりますが、誤記等により発生するいかなる損害の責任を負うものではありません。