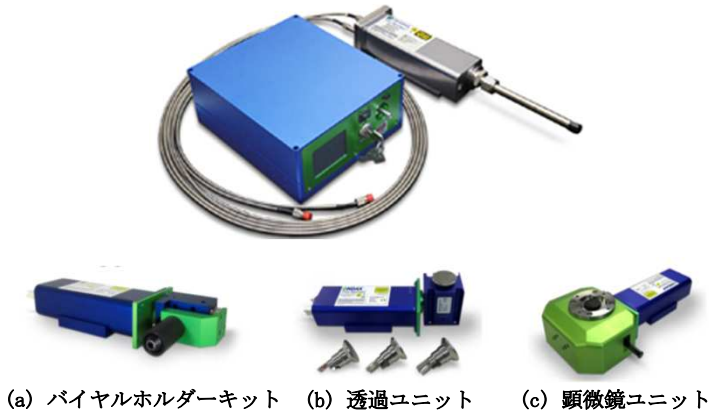


THz-Raman[®] Spectroscopy Probe

The “Structural Fingerprint” of Raman

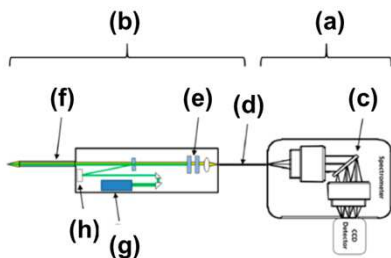


© 2019 COHERENT COMPANY All Rights Reserved.

THz-Raman[®] (低波数領域) の特徴

物質の分子構造-官能基、幾何異性、コンフォメーション、水素結合、化学構造の状態などは指紋領域と呼ばれる200~1800 cm^{-1} にピークが現れ、⁽¹⁾ 200 cm^{-1} 以下の領域は低波数領域と呼ばれ、化合物の結晶形など構造情報を表すピークが現れ、低波数領域では指紋領域のラマン散乱光強度より強くなるのが知られています。⁽²⁾

(1) Hédoux, Alain, et al. Polymorphic transformation of anhydrous caffeine upon grinding and hydrostatic pressurizing analyzed by low-frequency raman spectroscopy, *Journal of pharmaceutical sciences*, 102, 1, 162-170 (2013).
 (2) Hisada, Hiroshi, et al. Determining the Distribution of Active Pharmaceutical Ingredients in Combination Tablets Using Near IR and Low-Frequency Raman Spectroscopy Imaging, *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*. 68.2. 155-160 (2020).



Copyright © 2017, American Chemical Society

引用
 Inoue, Motoki, et al. "In situ monitoring of crystalline transformation of carbamazepine using probe-type low-frequency Raman spectroscopy." *Organic Process Research & Development* 21.2 (2017): 262-265.

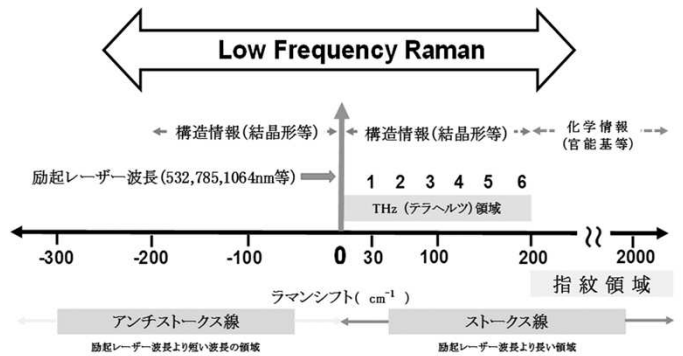
THz-Raman[®] (Probe型) の主な仕様

THz-RamanProbeを接続するラマン分光計の励起レーザー波長や測定可能領域に合わせて、THz-Raman[®] Probeの励起レーザー波長を選択する必要があります。(右, 上段)

Marqmetrix ALL IN ONE[®]へ接続する場合、THz-Raman[®] Probeの励起レーザー波長と測定可能領域は以下の通りです。(右, 下段)

Coherent社について

Ondax社は2000年にカリフォルニア州Monrovia市に設立された、レーザー用バンドパスフィルターやノッチフィルターなどのレーザー部品の開発・製造に特化した企業です。2011年からは既存のラマン分光器に取付け低波数領域のラマンスペクトルの測定を可能とするラマンモジュールの製造・販売を開始し、モジュールは世界中で使用されています。2019年にレーザー関連技術と製品を提供している世界有数の企業の1つであるCoherentに買収され、現在はCoherent社テラヘルツ事業部として活動しています。



THz-Raman[®] (Probe型) 接続例

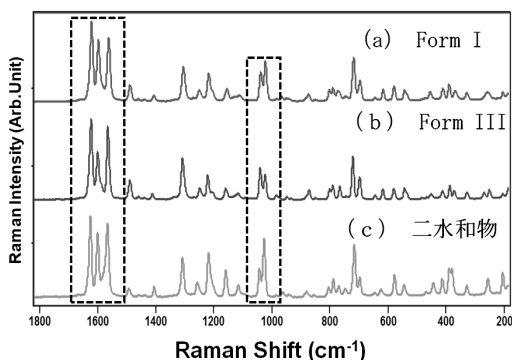
(a) Marqmetrixなどのラマン分光計, (b) THz-Raman[®] Probe system, (c) Grating, (d) ファイバー, (e) ノッチフィルター, (f) プロブ, (h) フィルター (g) 励起レーザー (808nmなど)

THz-Ramanシステムにはラマン散乱光を分光する機能は付属していません。本装置を使ってラマンスペクトルを取得するためにはMarqmetrixのALL IN ONE[®]などの分光器が必要です。

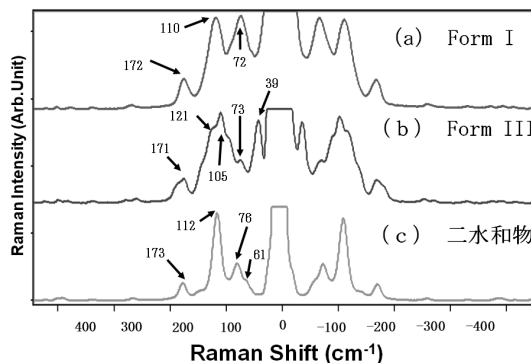
単位		主な仕様			
励起レーザー波長	nm	532	808/853	976	1064
レーザー強度 (試料面)	mW	50~250	100	300	200~450
サイズ (幅 X 長さ X 高さ)	mm	225 X 350 X 75			

単位		測定可能領域
励起レーザー波長		
808 nm	cm^{-1} (ワシシフト)	-263 ~ +2837
853 nm	cm^{-1} (ワシシフト)	-916 ~ +2184

(1) カルバマゼピン (CBZ) 結晶多形の識別



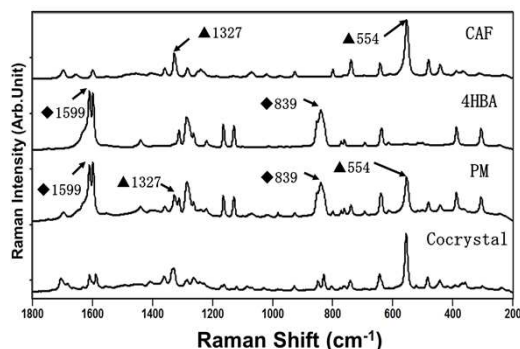
指紋領域のラマンスペクトル



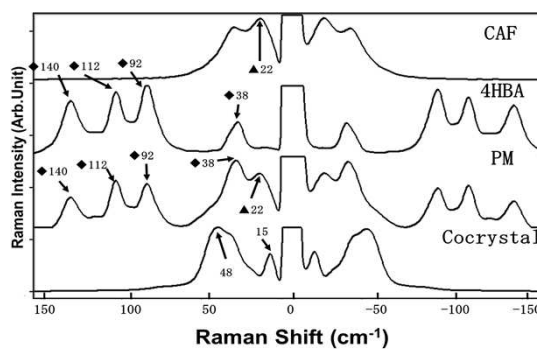
低波数領域のラマンスペクトル

通常領域 (左) それぞれのラマンスペクトルのピーク位置と強度の違いを微細な違いはあるものの、化学組成が同じ各結晶形のラマンスペクトルは酷似しており識別は困難です。一方、低波数領域ラマン分光法で得られたラマンスペクトル (右) を用いれば、CBZのI形では72, 110, および172 cm^{-1} , III形では39, 73, 105, 121, および171 cm^{-1} 、2水和物では 61, 76, 112, および173 cm^{-1} 付近にピークが認められ、CBZの結晶多形のスペクトル間には明確な違いを観察することができます。

(2) 物理的混合品と共結晶の識別



指紋領域のラマンスペクトル



低波数領域のラマンスペクトル

指紋領域と低波数領域の4-ヒドロキシ安息香酸 (4HBA), カフェイン (CAF), 物理的混合品 (PM) そして共結晶のラマンスペクトルを示します (左)。PM、および共結晶の指紋領域のラマンスペクトルにはCAF、4 HBAの特異的なピークが544 cm^{-1} (▲), 1599 cm^{-1} (◆) に強度の強いピークがあり、そして1327 cm^{-1} (▲) には中程度の強度を持ったピークを確認することができます。544 cm^{-1} と1327 cm^{-1} のピークはCAF由来であり、1599 cm^{-1} のピークは4 HBA由来のピークです。低波数領域で測定したスペクトルを示します (右)。物理的混合品のラマンスペクトルには 22, 38, 92, 112, 140 cm^{-1} にピークを確認できます。一方、共結晶に15 cm^{-1} と48 cm^{-1} の強度の強いピークはあるが、4 HBAおよびCAFにはありません。この事は共結晶の結晶構造が4 HBA, CAFの結晶構造と異なる事を示唆し、それは4 HBAにある40-140 cm^{-1} のピークが共結晶のラマンスペクトルに無い事でも証明されています。

【日本国内販売代理店】

デモ、価格などの詳細お問い合わせは
株式会社テックアナリシス
〒572-0020 大阪府寝屋川市田井西町18-10
電話/FAX 072-380-6245
メールアドレス: hisada@tekanalysis.jp
ホームページ: <http://tekanalysis.jp/>
携帯電話番号: 090 4037 2065