

★ “分析担当者が困るような試料” を解析しやすくするための前処理のコツ！
★ “豊富な” スペクトル、マッピングデータが解析の参考になる！

ラマン分光 スペクトルデータ 解析事例集

— 高分子、電池、電子デバイス、炭素材料、ガラス、医薬品、食品、細胞・組織 —

● 発刊日:2022年2月28日 ● 体 裁:A4判 405頁 ● 定 価:88,000円(税込) ● ISBN:978-4-86104-872-2
※大学、公的機関、医療機関の方には割引価格(アカデミック価格)で販売いたします。詳しくはお問い合わせください。



本書のポイント

技術情報協会 ラマン

★ラマンスペクトルで得られる情報とは何か？

- ・顕微ラマン、共焦点ラマン、表面増強ラマン、共鳴ラマン法、ROA、非線形ラマンで得られる情報とは？
- ・定性分析・未知物質の同定
- ・定量分析
- ・構造、結晶、転位、配向性、など、

★スペクトルを上手に読み取るためのデータ前処理、解析法

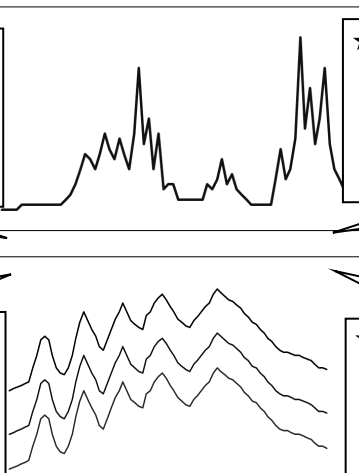
- ・ノイズ除去、ベースライン補正、一次微分と二次微分
- ・重なり合ったバンドを読み取るためのデータ処理
- ・スペクトルデータを使ってのケモトリックスの計算
- ・ケモトリックス解析の結果のマッピング表示

★試料調製、測定法の工夫で、良好なラマンスペクトルを獲得するには？

- ・微量成分(数%から数ppmレベルまで)の分析
- ・微小部(数 μm からサブ μm まで)の分析
- ・材料に埋没した試料を測定するための工夫と深さ方向分析
- ・蛍光が強い試料を測定するための工夫
- ・レーザーで試料にダメージを与えないで測定するための工夫

★高分子、電子デバイス、電池、無機材料、医薬品、食品、細胞の分析事例を多数掲載！

- ・微細構造解析、配向性
- ・深さ方向分析
- ・キャリア濃度の評価
- ・結晶の転位
- ・化粧品への浸透性評価
- ・結晶性分布、成分分布解析
- ・ひずみ、内部応力の解析
- ・熱伝導計測
- ・結晶多形の評価、結晶定量
- ・タンパク質活性部位の構造解析



執筆者(敬称略)

日本分光(株) 田村 耕平
名古屋大学 片山 昭久
大阪電気通信大学 森田 成昭
くまテクノソルターズ 宮下 喜好
京都大学 福岡 隆夫
東京工業大学 福永 悠
東京工業大学 岡田 哲男
理化学研究所/広島大学 渡邊 朋信
広島大学 藤田 英明
福井大学 前田 寧
京都大学 下赤 卓史
ニチアス(株) 中園 尾綾
ニチアス(株) 橋本 知美
名城大学 来海 博央
名古屋工業研究所 林 英樹
名古屋工業研究所 二村 道也
名古屋工業研究所 福田 徳生
あいち産業科学技術総合センター 松本 拓也
神戸大学 西野 孝
神戸大学 松尾 尚子
(株)KRI 光山 昌宏

宮城県産業技術総合センター (株)アイテス
(株)東レリサーチセンター
山梨大学
山梨大学
東北大学
名古屋工業大学
中京大学
(株)東レリサーチセンター
大阪府立大学
物質・材料研究機構
物質・材料研究機構
物質・材料研究機構
島根大学
名古屋大学
名古屋大学
立命館大学
立命館大学
(国研)産業技術総合研究所
自然環境・科学技術研究所/関西大学
アルプスアルバイン(株)
有明工業高等専門学校
日鉄テクノロジ(株)
日本バーカライジング(株)
明治薬科大学

鈴木 鋭二
清野 智志
岡村 慎二
西山 博通
大岡 潤治
伊藤 隆
池田 勝佳
須田 潤
杉江 隆一
梁劍波
市川 公善
寺地 徳之
小泉 聡
塚田 真也
大岡 大樹
岸田 英夫
毛利 真一郎
藤井 康裕
正井 博和
中嶋 悟
篠崎 浩子
鷹林 将
藤井 直美
吉岡 信明
井上 元基

同志社女子大学
神戸薬科大学
アイリックス(株)
佐賀大学
(地独)東京都立産業技術研究センター
(地独)東京都立産業技術研究センター
東洋大学
(国研)農業・食品産業技術総合研究機構
東北大学
東北大学
東北大学
東北大学
東北大学
理化学研究所
理化学研究所
大阪大学
関西学院大学
(国研)産業技術総合研究所
(国研)産業技術総合研究所
富山大学
徳島大学
東京医科歯科大学
東京医科歯科大学
東京医科歯科大学

木村 駿輔
坂根 徳康
須納 正範
海野 雅司
永川 榮泰
錦田 真弓
竹井 弘之
源川 拓磨
中林 孝和
大塚 大輝
高橋 大智
東北大学 梶本 真司
東北大学 山越 博幸
理化学研究所 江越 祐祐
理化学研究所 榎田 幹子
大阪大学 藤田 昌良
藤原 真介
赤木 祐香
木田 泰之
大嶋 佑介
大嶋 大介
南川 雅之
丸山 雄介
服部 淳彦

第1章 ラマン分光装置の構成と機器の選び方、使い方

1. ラマン分光法の概要
 - 1.1 ラマン分光法の歴史
 - 1.2 ラマン分光法の原理
 - 1.3 ラマン分光法の利点と欠点
 - 1.4 応用測定事例
2. 装置の概要
 - 2.1 分散型ラマンとFT-ラマン
 - 2.2 スペック別の装置分類
3. ラマン分光光度計を構成する素子とその特徴
 - 3.1 本体筐体・試料室
 - 3.2 レーザー
 - 3.3 対物レンズ
 - 3.4 光学分割素子
 - 3.5 レイラ-散乱光除去フィルター(リジェクションフィルター)
 - 3.6 スリット
 - 3.7 分光器
 - 3.8 検出器
 - 3.9 波長の校正
4. その他の光学系・オプション等について
 - 4.1 観察機能
 - 4.2 加熱冷却測定
 - 4.3 偏光測定
 - 4.4 複合分析
 - 4.5 ファ이버による測定

第2章 スペクトル・マッピングデータの読み方、前処理、多変量解析

1. ラマンスペクトルに含まれている情報
 - 1.1 一般的なラマン分光法で得られる情報
 - 1.2 顕微ラマン法、共焦点ラマン法、表面増強ラマン法、チップ増強ラマン法で得られる情報
 - 1.3 共鳴ラマン法、時間分解ラマン法で得られる情報
 - 1.4 ROAで得られる情報
 - 1.5 非線形ラマン法で得られる情報
 - 1.6 ハンドヘルド機器で得られる情報
2. 定性分析・未知物質の同定
 - 2.1 バンドの帰属
 - 2.2 指紋領域
 - 2.3 格子振動
 - 2.4 ライブラリの活用
3. 定量分析
 - 3.1 反応や物理的変化の過程におけるラマン強度変化
 - 3.2 内部標準試料のラマン強度との比較
 - 3.3 偏光ラマン測定によるバンド強度比
 - 3.4 気体の成分比の測定
 - 3.5 アンチストークス散乱強度との比を利用した温度の測定
4. スペクトルデータの処理
 - 4.1 ノイズ除去
 - 4.2 ベースライン補正、一次微分と二次微分
 - 4.3 補間、ノーマライズ、平均セントラリング
 - 4.4 重なり合ったバンドを読み取るためのデータ処理

- 5.1 差スペクトル
- 5.2 カーブフィッティング、デコンボリューション
- 5.3 量子化学計算
- 5.4 二次元相関分光法
6. ケモトリックス
 - 6.1 次元削減
 - 6.2 回帰
 - 6.3 スペクトル分解
7. マッピングデータの解析
 - 7.1 特定のバンド強度のマッピング表示
 - 7.2 ケモトリックス解析の結果のマッピング表示

第3章 ラマン分光分析における測定手法と試料調製

1. 微量成分分析(数%から数ppmレベルまで)
2. 微小部分析(数 μm からサブ μm まで)
3. 透明樹脂やガラス内部に埋没した試料を測定するための工夫と深さ方向分析
 - 4.1 Photo Breach(光退色)
 - 4.2 スリットや共焦点アパーチャー制限
 - 4.3 多波長励起光による測定
 - 4.4 Anti-Stokesスペクトルの活用
 - 4.5 蛍光発生物質の除去および消光剤の利用
5. レーザで試料にダメージを与えないで測定するための工夫
6. 前処理の工夫

<p>第4章 新しいラマン測定法、機械学習を用いたスペクトル解析</p>	<p>3. 他手法を併用した顕微ラマン分光法によるフィルム中の微小異物の分析 4. 樹脂中に混入した着色異物の顕微ラマン分析</p>	<p>第2節 重鉛めっき鋼板変色部のラマン分析 1. 分析試料 2. 分析方法 3. 分析結果および考察</p>
<p>第1節 貴金属ナノ粒子の凝集を用いた表面増強ラマン散乱 1. 表面増強ラマン散乱 (SERS) 2. SERSスペクトルの形を決める要因 3. 貴金属ナノ粒子の凝集を用いた表面増強ラマン散乱</p>	<p>第6章 二次電池・燃料電池をラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>	<p>第3節 鋼材の表面スケールの応力分布測定</p>
<p>第2節 凍結によるラマン分光の高感度化 1. 凍結による金属ナノ粒子の凝集制御とラマン分光の高感度化 2. 相互内部標準によるSERS強度の補正とDNA核酸塩基のratio metric計測 3. 表面増強ラマン散乱強度の統計解析による定量計測</p>	<p>第1節 PEMFC電解質膜内部の水分布とその化学状態の測定 1. CARS分光法 2. 測定系・解析手法 3. 測定結果</p>	<p>第10章 医薬品、化粧品、食品をラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>
<p>第3節 ラマン散乱スペクトルと機械学習手法による細胞種類、状態の識別 1. 細胞のラマン散乱スペクトル計測 2. 機械学習を用いた細胞指紋技術 3. 細胞のラマン散乱スペクトルの空間分布情報の利活用 4. 細胞のラマン散乱スペクトルと遺伝子発現との関係性 5. 細胞のラマン散乱スペクトル計測の医療応用展開に向けて</p>	<p>第2節 リチウムイオン電池用正極材料のラマン分光測定 1. 正極材料のその場ラマン分光測定 1.1 高電位下における可視光を用いたLiCoO₂薄膜のその場ラマン分光測定 1.2 LiCoO₂合材電極のFTラマン分光測定と電気化学特性 1.3 高電位下におけるLiCoO₂合材電極のその場FTラマン分光測定</p>	<p>第1節 低波数ラマン分光による医薬品原薬の結晶多形評価と結晶定量 1. 原薬結晶多形の評価 2. 分子複合体の識別 3. 結晶転移のモニタリング 4. 固形製剤中原薬結晶形の定量的評価</p>
<p>第5章 高分子をラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>	<p>第3節 電極/電解質界面の構造解析 1. 白金電極表面でのSERS測定 2. 電極/電解質界面での表面増強電子ラマン散乱</p>	<p>第2節 クルクシナノ非晶質製剤の固体状態の観察 : 水に懸濁した際の粒子表面状態の経時変化</p>
<p>第1節 顕微ラマンによる高分子微細構造解析 1. 温度応答性高分子について 2. 顕微ラマンによる相分離の解析 3. 添加物混合系での相分離 4. 顕微ラマンで見る高分子結晶 5. 偏光ラマン測定によるポリエチレンの球晶の解析 6. 偏光ラマン測定によるポリエチレンオキサライド (PEO) 錯体結晶の解析</p>	<p>第7章 電子デバイスをラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>	<p>第3節 結晶多形の高速スクリーニング</p>
<p>第2節 ラマン分光法によるパーフルオロアルキル鎖のねじれ構造解析 1. パーフルオロアルキル鎖の分子振動 2. パーフルオロアルキル鎖のねじれ構造に起因するアトロプ異性のラマン光学活性 (ROA) による識別</p>	<p>第1節 半導体材料の残留応力評価 1. 熱ストレスのラマンスペクトルの関係 2. 高温ラマンイメージング測定方法</p>	<p>第4節 液中異物検査</p>
<p>第3節 ラマンイメージングによるふっ素樹脂の結晶性分布解析</p>	<p>第2節 SiC(シリコンカーバイド)の応力とキャリア濃度の評価 1. SiCのラマンスペクトルの特徴 2. ラマン分光法による応力評価原理 3. ラマン分光法によるキャリア濃度評価原理 4. ラマン分光法によるSiC MOSFETの応力評価事例 5. ラマン分光法によるSiCのキャリア濃度評価事例</p>	<p>第5節 錠剤のラマンイメージング</p>
<p>第4節 長繊維強化プラスチック (CFRP) 中の内部応力マッピング 1. 材料 2. 実験装置 3. 実験結果 3.1 CFRP中の残留応力マッピング 3.2 CFRP中のき裂先端近傍の内部応力マッピング</p>	<p>第3節 ラマン分光法によるGa_{0.9}N/ダイヤモンド接合界面の残留応力評価 1. Ga_{0.9}N/ダイヤモンド接合界面の作製 2. ラマン分光法によるGa_{0.9}N/ダイヤモンド接合界面の残留応力評価 3. Ga_{0.9}N/ダイヤモンド接合界面の断面TEM像</p>	<p>第6節 ラマン光学活性分光法を用いたタンパク質活性部位の構造解析 1. ラマン光学活性分光とは 2. ラマン光学活性分光の色素タンパク質への応用</p>
<p>第5節 顕微ラマン法による試験片表面の添加剤の分布分析およびその応用展開 1. アセチレン含有ポリカプロラク톤におけるアセチレンユニットの顕微ラマン観察 2. アセチレン含有ポリカプロラク톤によるひずみの検出 3. ポリエステル中のπ共役化合物の挙動</p>	<p>第4節 CVDダイヤモンド中の転位の評価 1. 転位の評価に共焦点ラマンイメージングを用いる理由 2. 試料および測定の概要 3. 転位のラマンイメージング</p>	<p>第7節 皮膚の含水率と組成物測定及び化粧品の浸透性評価 1. 皮膚の含水率測定及び角層厚評価 2. 皮膚組成物の測定 3. 皮膚に塗布した物質の浸透性評価</p>
<p>第6節 顕微ラマン分光を用いた高分子材料の成分分布解析 1. 背景 2. 評価装置 3. ポリメタクリル酸メチル (PMMA) / ポリスチレン (PS) のポリマーブレンド 4. ヒドロキシアパタイト (HAp) 充てんポリ-L-乳酸 (PLLA) の複合材料 5. エポキシ樹脂 (EP) / ポリエーテルスルホン (PES) のポリマーブレンド 6. アイソタクチックポリプロピレン (PP) / エチレン-オクテン共重合体 (EOR) のポリマーブレンド 7. イオン液体 (IL) 添加ポリスチレン (PS) 8. アイソタクチックポリプロピレン (PP) とエチレン-オクテン共重合体 (EOR) ホットメルト接着剤の界面評価 9. アイソタクチックポリプロピレン (PP) とシアノアクリレート (CA) 接着剤の界面評価 10. アイソタクチックポリ-1-ブテン (PB) とポリメチルフェニルシラン (PMPS) 接着剤の界面評価 11. ラマン分光評価における問題点やその他の評価法</p>	<p>第5節 多結晶アルミナの結晶粒内の応力成分マッピング 1. 材料 2. ラマンスペクトル測定から応力成分までの同定プロセス 3. 実験装置 4. 多結晶アルミナの結晶粒内の応力成分マッピング</p>	<p>第8節 食品を表面増強ラマン法で分析する際の実例 1. 表面増強ラマン分光法 2. 測定の実例 3. 他のグループによる測定報告例 4. 特殊SERSデバイス</p>
<p>第7節 PE(ポリエチレン)の材質と熱結晶化・配向性評価 1. PEの材質分析 2. 熱結晶化 3. 配向性 4. PE温水浸漬試験品の結晶性分布解析事例</p>	<p>第6節 角度分解偏光ラマン分光法による誘電体の不均一性評価 1. 強誘電体結晶PbTiO₃からの角度分解偏光ラマン散乱 2. 不均一性を有するリラクサー強誘電体からの角度分解偏光ラマン散乱</p>	<p>第9節 ラマン分光法を用いた高カロテノイドマトの判別分析 1. ラマン分光法による農産物に含まれるカロテノイドの分析 2. ラマン分光法による高リコピントマトの判別分析</p>
<p>第8節 温度可変ラマンによる各種プラスチック材料の特性評価 1. PETの加熱測定におけるラマンスペクトルの変化 (ガラス転移、結晶化、融解) 2. 水溶液の溶質成分のラマン分光 (低温測定) 3. ナイロンの吸湿による構造変化解析 (加温測定)</p>	<p>第7節 単層グラフェンのラマン分光スペクトル 1. 単層グラフェンのデバイス応用 2. 測定試料 3. 使用機器と測定条件 4. 実験結果 5. 解析</p>	<p>第10章 生体組織、細胞をラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>
<p>第9節 粘着剤(特殊ゴム系粘着剤)のラマンスペクトル</p>	<p>第8節 ラマン分光を用いた架橋ツイスト2層グラフェンの熱伝導計測 1. 背景 2. 試料と実験方法 3. ツイスト2層グラフェンの熱伝導計測</p>	<p>第11節 顕微ラマン分光法を用いた細胞内の脂肪滴の直接観測 1. 単一細胞のラマン測定 1.1 ラマン顕微鏡の生細胞への応用 1.2 ラマンイメージングシステム 1.3 単一細胞のラマンスペクトルの例 2. 細胞内にある脂肪滴のラマン測定 2.1 細胞内導入分子の測定 2.2 シス脂肪酸とトランス脂肪酸 2.3 脂肪滴のラマンスペクトル</p>
<p>第10節 偏光板の多層分析 1. 材料調査の流れ 2. ラマン分光分析結果 3. 深さ方向分析</p>	<p>第8章 炭素材料、ガラスをラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>	<p>第11章 生体組織、細胞をラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>
<p>第11節 PETフィルムのスペクトル 1. 使用した装置 2. 分析結果</p>	<p>第1節 非弾性光散乱による酸化ガラスの物性評価 1. ガラスにおける非弾性光散乱 2. 実験装置の実例 3. ガラスの光散乱スペクトルの実例</p>	<p>第1節 ラマン顕微鏡を用いた細胞内の生体分子密度変化 1. 細胞内の分子複雑環境 1.2 細胞内の水の密度定量 2. 細胞周期に伴う分子複雑環境の変化 2.1 細胞周期の制御 2.2 細胞周期に伴うラマンスペクトルの変化</p>
<p>第12節 PENフィルムのスペクトル 1. PENとPETの物性比較 2. PENのラマン分析</p>	<p>第2節 ラマン・赤外分光によるリン酸セリウムガラスの構造解析 1. (Ce, La)リン酸ガラスの作成と元素組成 2. (Ce, La)リン酸ガラスのラマン・スペクトル 3. (Ce, La)リン酸ガラスの赤外スペクトル 4. (Ce, La)リン酸ガラスの可視光スペクトル 5. (Ce, La)リン酸ガラスのX線光電子スペクトル 6. (Ce, La)リン酸ガラスの各種スペクトルデータとCeモル分率 7. (Ce, La)リン酸ガラスの構造モデル</p>	<p>第2節 ラマン顕微鏡を用いた細胞内の生体分子密度変化 1. 細胞内の分子複雑環境 1.2 細胞内の水の密度定量 2. 細胞周期に伴う分子複雑環境の変化 2.1 細胞周期の制御 2.2 細胞周期に伴うラマンスペクトルの変化</p>
<p>第13節 ラマン分光を活用した高分子材料中の異物分析 1. ラマン分光法による異物分析の概要 2. 顕微ラマン分光法による高分子材料中の微小異物の分析</p>	<p>第3節 ラマン分光法によるダイヤモンドライクカーボンの化学構造解析 1. 序論 2. 試料 3. 理論 4. 結果と考察</p>	<p>第3節 ラマン顕微鏡を用いた細胞内の温度観測 1. 細胞内の水のラマンスペクトルの温度依存性 1.1 水のラマンスペクトルの温度依存性 1.2 細胞内の水のラマンスペクトルの温度依存性 2. 薬物添加に伴う細胞内温度変化の観測 2.1 FCCP添加に伴う細胞のラマンスペクトルの変化 2.2 水のラマンイメージングによる細胞内温度分布の可視化</p>
<p>第4節 粘着剤(特殊ゴム系粘着剤)のラマンスペクトル</p>	<p>第4節 非晶質の炭素材のラマン測定</p>	<p>第4節 ラマン標識を用いた低分子化合物の生細胞解析 1. アルキルタグラマンイメージング (ATRI) 2. 半定量解析 3. 二重標識イメージング 4. ラマン標識の相対散乱強度</p>
<p>第5節 偏光板の多層分析 1. 材料調査の流れ 2. ラマン分光分析結果 3. 深さ方向分析</p>	<p>第9章 金属材料をラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>	<p>第5節 顕微ラマン分光法を用いたバイオフィルム中のカロテノイドの非破壊分析 1. ロドコッカス属細菌バイオフィルム中のカロテノイド 2. ピンクバイオフィルム中のカロテノイド</p>
<p>第6節 ペイント式ラマン分光顕微鏡システムを用いた細胞判別 1. 概要 2. ヒトT細胞のラマンスペクトル 3. 線維芽細胞 (Mouse Embryonic Fibroblast; MEF) のラマンスペクトル 4. ヒト間葉系幹細胞 (human Mesenchymal stem cell, hMSC) 5. ヒト多能性幹細胞 (human induced Pluripotent Stem Cell, hiPSC) 6. 活性化T細胞のラマンスペクトル</p>	<p>第1節 ラマンイメージングによる鋼板上の初期腐食生成物の構造解析 1. 分析試料 2. 分析方法 3. 分析結果および考察</p>	<p>第6節 ペイント式ラマン分光顕微鏡システムを用いた細胞判別 1. 概要 2. ヒトT細胞のラマンスペクトル 3. 線維芽細胞 (Mouse Embryonic Fibroblast; MEF) のラマンスペクトル 4. ヒト間葉系幹細胞 (human Mesenchymal stem cell, hMSC) 5. ヒト多能性幹細胞 (human induced Pluripotent Stem Cell, hiPSC) 6. 活性化T細胞のラマンスペクトル</p>
<p>第7節 赤外分光法とラマン分光法による骨質の解析 1. 骨質とは何か 2. 赤外分光法およびラマン分光法による骨組織の計測 3. 骨粗鬆症モデルマウスにおける骨質のラマン分光分析</p>	<p>第4節 非晶質の炭素材のラマン測定</p>	<p>第7節 赤外分光法とラマン分光法による骨質の解析 1. 骨質とは何か 2. 赤外分光法およびラマン分光法による骨組織の計測 3. 骨粗鬆症モデルマウスにおける骨質のラマン分光分析</p>
<p>第8節 ラマン散乱分光法による脂質分子解析 1. 脂質分子のラマンスペクトル解析 2. 肝臓の脂質分子解析</p>	<p>第9章 金属材料をラマン分光で分析する際のスペクトルの読み方</p>	<p>第8節 ラマン散乱分光法による脂質分子解析 1. 脂質分子のラマンスペクトル解析 2. 肝臓の脂質分子解析</p>
<p>第9節 顕微ラマンによるキノギョ・メダカのウロコの構造解析 1. キノギョのウロコのラマンスペクトル 2. メダカのウロコのラマンスペクトル</p>	<p>第1節 ラマンイメージングによる鋼板上の初期腐食生成物の構造解析 1. 分析試料 2. 分析方法 3. 分析結果および考察</p>	<p>第9節 顕微ラマンによるキノギョ・メダカのウロコの構造解析 1. キノギョのウロコのラマンスペクトル 2. メダカのウロコのラマンスペクトル</p>

