

(19) 日本国特許庁(JP)

## (12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第4498564号  
(P4498564)

(45) 発行日 平成22年7月7日(2010.7.7)

(24) 登録日 平成22年4月23日(2010.4.23)

(51) Int.Cl.

F 1

GO 1 N 21/27 (2006.01)  
GO 1 N 21/35 (2006.01)GO 1 N 21/27  
GO 1 N 21/35F  
Z

請求項の数 8 (全 13 頁)

(21) 出願番号 特願2000-242887 (P2000-242887)  
 (22) 出願日 平成12年8月10日 (2000.8.10)  
 (65) 公開番号 特開2002-55045 (P2002-55045A)  
 (43) 公開日 平成14年2月20日 (2002.2.20)  
 審査請求日 平成19年7月31日 (2007.7.31)

(73) 特許権者 000232689  
 日本分光株式会社  
 東京都八王子市石川町2967番地の5  
 (74) 代理人 100092901  
 弁理士 岩橋 祐司  
 (72) 発明者 赤尾 賢一  
 東京都八王子市石川町2967番地の5  
 日本分光株式会社内  
 (72) 発明者 神 ちひろ  
 東京都八王子市石川町2967番地の5  
 日本分光株式会社内  
 (72) 発明者 坂巻 徹  
 東京都八王子市石川町2967番地の5  
 日本分光株式会社内

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 試料識別方法およびその装置

## (57) 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

未知試料のスペクトル測定を行なう測定工程と、

前記測定工程で得た未知試料のスペクトルと、基準物識別指標として基準物と前記基準物に含まれるであろう微量物質の混合比を変えて各標準試料を測定して得られた標準スペクトルのうち最も相関係数の高い標準スペクトルを検索することにより、該未知試料中の前記基準物の識別を行なう基準物識別工程と、

あらかじめ前記基準物に含まれるであろう微量物質毎に、基準物と微量物質を種々の濃度で混合した標準試料を測定して作成しておいた検量線に、前記測定工程で得た測定結果を当てはめ、該基準物識別工程で識別された基準物に含まれるであろう微量物質の定量を行なう微量物質定量工程と、

前記定量工程で得た定量結果に基づいて前記基準物識別工程で識別された基準物に含まれるであろう微量物質の識別を行なう微量物質識別工程と、

を備えたことを特徴とする試料識別方法。

## 【請求項 2】

請求項 1 記載の試料識別方法において、

前記基準物識別工程は、前記基準物識別指標として該基準物の標準スペクトルを用い、該標準のスペクトル形状と前記未知試料のスペクトル形状との相関に基づいて、未知試料中の基準物の識別を行なうことを特徴とする試料識別方法。

## 【請求項 3】

10

20

請求項 1 又は 2 記載の試料識別方法において、

前記微量物質定量工程は、前記未知試料のスペクトルデータから、前記基準物識別工程で識別された基準物に含まれるであろう微量物質のピーク高さを基準物のピーク高さを基準に求め、

求めたピーク高さ比をその微量物質の検量線に当てはめ、定量を行なうことを特徴とする試料識別方法。

【請求項 4】

請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の試料識別方法において、

前記微量物質識別工程は、前記微量物質定量工程で得た定量結果に基づいて、基準物に含まれるであろう微量物質の中から少なくとも最多微量物質名を検索し、その定量結果と共に出力することを特徴とする試料識別方法。

10

【請求項 5】

未知試料のスペクトル測定を行なう測定手段と、

前記測定手段で得た未知試料のスペクトルデータを記憶するデータ記憶手段と、

前記データ記憶手段の未知試料のスペクトルと、基準物識別指標として基準物と前記基準物に含まれるであろう微量物質の混合比を変えて各標準試料を測定して得られた標準スペクトルを記憶する基準物識別ライブラリと、

前記データ記憶手段の未知試料のスペクトルデータと前記標準スペクトルのうち最も相関係数の高い前記標準スペクトルを検索することにより前記未知試料中の基準物の識別を行なう基準物識別手段と、

20

あらかじめ前記基準物に含まれるであろう微量物質毎に、基準物と微量物質を種々の濃度で混合した標準試料を測定して作成しておいた検量線を記憶する定量ライブラリと、

前記測定手段で得た測定結果を、前記定量ライブラリの検量線に当てはめ、該基準物識別手段で識別された基準物に含まれるであろう微量物質の定量を行なう微量物質定量手段と、

前記微量物質定量手段で得た定量結果に基づいて前記基準物識別工程で識別された基準物に含まれるであろう微量物質の識別を行なう微量物質識別手段と、

を備えたことを特徴とする試料識別装置。

【請求項 6】

請求項 5 記載の試料識別装置において、

30

前記基準物識別手段は、前記基準物識別指標として該基準物の標準スペクトルを用い、該標準のスペクトル形状と前記未知試料のスペクトル形状との相関に基づいて、未知試料中の基準物の識別を行なうことを特徴とする試料識別装置。

【請求項 7】

請求項 5 又は 6 記載の試料識別装置において、

前記微量物質定量手段は、前記未知試料のスペクトルデータから、前記基準物識別手段で識別された基準物に含まれるであろう微量物質のピーク高さを前記基準物のピーク高さを基準に求め、

求めたピーク高さ比をその微量物質の検量線に当てはめ、定量を行なうことを特徴とする試料識別装置。

40

【請求項 8】

請求項 5 ~ 7 のいずれかに記載の試料識別装置において、

前記微量物質識別手段は、前記微量物質定量工程で得た定量結果に基づいて、基準物に含まれるであろう微量物質の中から少なくとも最多微量物質名を検索し、その定量結果と共に出力することを特徴とする試料識別装置。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は試料識別方法およびその装置、特に一の未知試料中に含まれる複数成分の分類手法に関する。

50

## 【0002】

## 【従来の技術】

従来より食品をはじめ、医薬品、繊維、化成品、鉱物、土壤等の成分分析のため、例えばFTIRを用いたKBr錠剤法が用いられる。

このKBr錠剤法では、試料をKBr結晶の粉末と混ぜて圧力をかけて錠剤をつくり、これをFTIRで赤外スペクトル測定する。そして、使用者は、測定した赤外スペクトルのピークの形状を見て、未知試料の識別等を行っている。

ところで、最近、覚醒剤をはじめとする各種薬物が巷で氾濫しており、結果として、それを取り締まる警察や税関では、押収した薬物を迅速に、かつ正確に識別する必要がある。

## 【0003】

10

すなわち、覚醒剤（一般的にはメタアンフェタミンのみを覚醒剤という）と麻薬（ヘロイン、コカイン等）では規制する法律が異なる。さらに覚醒剤の場合、不純物の割合によって覚醒剤取締法か、覚醒剤原材料取締法かの適用法令の区分がなされているからである。また、試料としては、前記覚醒剤等の薬物に限られず、リサイクルのための分別を行なうため、例えば試料がプラスチックか否かを識別し、該プラスチックに含まれるであろう可塑剤の識別や定量が行える技術の開発も強く望まれている。

従来は、このような種々の試料の識別や、不純物の識別、定量についても、前記FTIRを用いたKBr錠剤法が用いられる。

## 【0004】

20

## 【発明が解決しようとする課題】

しかしながら、試料には微量成分や吸収ピークが微弱な成分もあり、このような試料を扱うには高い測定精度が要求される。

このため、従来、一般的な試料を想定した精度では、前述のような成分の測定に用いるには、面倒であった。

しかも、測定したスペクトルを分析する使用者にも、高度な分析能力が必要となるので、分析精度の向上の難しさの要因となる。また、熟練者であっても大変な分析であり、面倒であった。

## 【0005】

30

この結果、分析が困難な成分であっても、基準物の識別は勿論、その不純物の詳細な識別、定量分析をも容易にかつ正確に行える技術の開発が強く望まれていたものの、従来はこれを解決することのできる適切な技術が存在しなかった。

本発明は前記従来技術の課題に鑑みなされたものであり、その目的は未知試料の中の基準物の識別、並びに該基準物に含まれる不純物の識別及び定量を、容易に且つ正確に行える試料識別方法およびその装置を提供することにある。

## 【0006】

## 【課題を解決するための手段】

前記目的を達成するために本発明にかかる試料識別方法は、測定工程と、基準物識別工程と、不純物定量工程と、不純物識別工程と、を備えることを特徴とする。

ここで、前記測定工程は、未知試料のスペクトル測定を行なう。

また、前記基準物識別工程は、前記測定工程で得た測定結果に基準物識別指標を適用し、該未知試料中の基準物の識別を行なう。

40

## 【0007】

前記不純物定量工程は、あらかじめ前記基準物に含まれるであろう不純物毎に、基準物と不純物を種々の濃度で混合した標準試料を測定して作成しておいた検量線に、前記測定工程で得た測定結果を当てはめ、該基準物識別工程で識別された基準物に含まれるであろう不純物の定量を行なう。

前記不純物識別工程は、前記定量工程で得た定量結果に基づいて前記基準物識別工程で識別された基準物に含まれるであろう不純物の識別を行なう。

## 【0008】

50

なお、本発明において、前記基準物識別工程は、前記基準物識別指標として該基準物の標

準スペクトルを用い、該標準のスペクトル形状と前記未知試料のスペクトル形状との相関に基づいて、未知試料中の基準物の識別を行なうことが好適である。

また、本発明において、前記不純物定量工程は、前記未知試料のスペクトルデータから、前記基準物識別工程で識別された基準物に含まれるであろう不純物のピーク高さを基準物のピーク高さを基準に求め、求めたピーク高さ比をその不純物の検量線に当てはめ、定量を行なうことも好適である。

#### 【0009】

また、本発明において、前記不純物識別工程は、前記不純物定量工程で得た定量結果に基づいて、基準物に含まれるであろう不純物の中から少なくとも最多不純物名を検索し、その定量結果と共にに出力することも好適である。

10

また、前記目的を達成するために本発明にかかる試料識別装置は、測定手段と、データ記憶手段と、基準物識別ライブラリと、基準物識別手段と、定量ライブラリと、不純物定量手段と、不純物識別手段と、を備えることを特徴とする。

ここで、前記測定手段は、未知試料のスペクトル測定を行なう。

#### 【0010】

また、前記データ記憶手段は、前記測定手段で得た未知試料のスペクトルデータを記憶する。

前記基準物識別ライブラリは、基準物識別指標を記憶する。

前記基準物識別手段は、前記データ記憶手段の未知試料のスペクトルデータに前記基準物識別ライブラリの基準物識別指標を適用し、前記未知試料中の基準物の識別を行なう。

20

#### 【0011】

前記定量ライブラリは、あらかじめ前記基準物に含まれるであろう不純物毎に、基準物と不純物を種々の濃度で混合した標準試料を測定して作成しておいた検量線を記憶する。

前記不純物定量手段は、前記測定手段で得た測定結果を、前記定量ライブラリの検量線に当てはめ、該基準物識別手段で識別された基準物に含まれるであろう不純物の定量を行なう。

#### 【0012】

前記不純物識別手段は、前記不純物定量手段で得た定量結果に基づいて前記基準物識別工程で識別された基準物に含まれるであろう不純物の識別を行なう。

なお、本発明において、前記基準物識別手段は、前記基準物識別指標として該基準物の標準スペクトルを用い、該標準のスペクトル形状と前記未知試料のスペクトル形状との相関に基づいて、未知試料中の基準物の識別を行なうことが好適である。

30

#### 【0013】

また、本発明において、前記不純物定量手段は、前記未知試料のスペクトルデータから、前記基準物識別手段で識別された基準物に含まれるであろう不純物のピーク高さを前記基準物のピーク高さを基準に求め、求めたピーク高さ比をその不純物の検量線に当てはめ、定量を行なうことも好適である。

さらに、本発明において、前記不純物識別手段は、前記不純物定量工程で得た定量結果に基づいて、基準物に含まれるであろう不純物の中から少なくとも最多不純物名を検索し、その定量結果と共にに出力することも好適である。

40

#### 【0014】

ここにいう不純物とは、例えば基準物が覚醒剤（メタアンフェタミン）（以下、M aという）の場合は、カフェインソディウムベンゾエイト（以下、アンナカという）、アンタフエタミン（以下、A pという）、エフェドリン（以下、E pという）、ジメチルアンタフエタミン（以下、D M Aという）等をいう。

また、基準物がプラスチックの場合は、例えば該プラスチックに含まれるであろう可塑剤等を不純物という。

#### 【0015】

##### 【発明の実施の形態】

以下、図面に基づき本発明の好適な一実施形態について説明する。

50

## 第一実施形態

図1には本発明の第一実施形態にかかる試料識別装置の概略構成が示されている。

なお、本実施形態では、検索対象として覚醒剤、麻薬等の薬物を想定し、覚醒剤に含まれるであろう不純物としてのアンナカ、A p、E p、D M Aの定量を行い、その定量結果に基づいて最多不純物名とその定量値を出力する場合について説明する。

### 【0016】

同図に示す試料識別装置10は、測定手段14と、コンピュータ16を含む。

ここで、前記測定手段14は、例えば拡散反射測定装置(FTIR)からなり、試料ホルダ17に充填された試料22の赤外スペクトル測定を行なう。

すなわち、光源18からの赤外光L1は、試料照射手段20により試料ホルダ17の試料22に照射される。試料22からの拡散反射光L2は、反射鏡24により集光され、検出器26により検出される。

### 【0017】

そして、検出器26の出力はAD変換され、コンピュータ16に入力される。

前記コンピュータ16は、CPU(基準物識別手段、不純物定量手段、不純物識別手段)28と、HDD30を含む。

前記HDD30は、データ記憶手段32と、基準物識別ライブラリ33と、定量ライブラリ36を含む。

ここで、前記データ記憶手段32は、測定手段14で得た未知試料のスペクトルデータを記憶している。

### 【0018】

前記基準物識別ライブラリ33は、基準物識別指標として、覚醒剤(Ma)、麻薬等を測定して得られた各基準物の標準スペクトルデータを記憶している。

前記HDD30は、覚醒剤(Ma)に固有のピーク波数情報を記憶している。

また、このHDD30は、覚醒剤(Ma)に含まれるであろう不純物に固有のピーク波数情報を、例えばアンナカ、A p、E p、D M Aに固有のピーク波数情報を記憶している。

### 【0019】

前記定量ライブラリ36は、覚醒剤に含まれるであろう不純物としてのアンナカ、A p、E p、D M A毎に、定量分析のための検量線を記憶している。

ここで、本実施形態では、検量線は、各不純物毎に、基準物(Ma)と不純物を種々の濃度、例えば95対5%、90対10%、85対15%、80対20%、75対25%、70対30%、65対35%、60対40%等の割合で混合した各標準試料のスペクトルを測定し、不純物の測定値/基準物の測定値を縦軸に、濃度を横軸にとってグラフ化したものを用いている。

### 【0020】

ここにいう測定値とは、定量可能なものであれば任意のものを用いることができ、例えば吸光度、KM値、拡散反射光の強度等が挙げられる。

そして、基準物識別手段としてのCPU28は、データ記憶手段32の未知試料のスペクトルデータに、基準物識別ライブラリ33の基準物識別指標を適用し、未知試料中の基準物を識別する。

すなわち、CPU28は、まず、基準物識別ライブラリ33の各標準スペクトルの形状と、データ記憶手段32の未知試料のスペクトルの形状の比較を行ない、相関係数を求める。

### 【0021】

そして、最も相関係数が高い標準スペクトルを検索することにより、未知試料中の基準物が覚醒剤か、麻薬か、あるいはその他かを識別することができる。

覚醒剤と識別された場合、不純物定量手段としてのCPU28は、データ記憶手段32の未知試料のスペクトルデータから不純物の定量情報を取出す。

すなわち、CPU28は、未知試料のスペクトルデータよりHDD30に記憶されている不純物に固有のピーク波数でのピーク高さ、例えばアンナカに固有のピーク波数でのピー

10

20

30

40

50

ク高さと、M a に固有のピーク波数でのピーク強度を読み取る。

【0022】

そして、これらの比を求め、定量ライブラリ 36 のアンナカの検量線に当てはめ、アンナカの濃度を求める。

このような不純物の定量を A p , E p , DMA の各不純物についても行なう。

全ての不純物の定量が終了した後、CPU28 は、前記定量結果に基づいて最多不純物を検索する。これにより、最多不純物がアンナカか、A p か、E p か、DMA かを識別することができる。

最多不純物の識別後、CPU28 は、定量結果に基づいて最多不純物名とその定量値を、出力手段としてのディスプレイ 40 に画面表示したり、プリンタ 42 に印刷する。

10

【0023】

本発明の第一実施形態にかかる試料識別装置 10 は、概略以上のように構成され、以下にその作用について図 2 に示すフローチャートを参照しつつ説明する。

まず、試料ホルダに試料を充填する (S10)。

前記試料 22 の充填後、試料ホルダ 17 を本実施形態にかかる試料識別装置 10 にセットし、測定を開始する (S12)。

得られた未知試料の測定データは、コンピュータ 16 の CPU28 に入力され、データ処理された後、HDD30 のデータ記憶手段 32 に赤外スペクトルデータとして記憶される。

【0024】

20

つぎに、測定したスペクトルから基準物の識別を行なう (S14)。

ここで、通常は、熟練者が測定したスペクトルデータの形状を見て、識別等を行なうのが一般的であるが、このような作業は非常に専門的であるので、面倒であった。

この問題を解決するために、あらかじめ基準物のみの標準スペクトル、不純物のみの標準スペクトルを蓄えておき、未知試料のスペクトル形状と最も相関の高い標準スペクトルが何かを検索し、未知試料中の基準物や不純物の識別を行なう方法も考えられる。

【0025】

しかしながら、この場合、未知試料中の基準物や不純物の識別までは行なえるが、定量は困難である。

そこで、基準物と不純物の混合比が 95 対 5 %、90 対 10 %... 等というように、例えば 5 % 間隔で変えられた各標準試料を測定して標準スペクトルを蓄えておけば、未知試料のスペクトル形状と最も相関係数の高い標準スペクトルを検索することにより、未知試料の基準物の識別と、不純物の簡易な定量を行なう方法も考えられる。

30

【0026】

しかしながら、このような検索方法を用いた場合、不純物の定量結果は、5 %、10 %、... 等というように標準試料中の不純物の混合比の間隔でしか得られず、それ以下の定量結果が得られないので、特に微量成分を扱う場合には定量精度の改善が望まれる。

そこで、本実施形態では、CPU28 が以下の一連の処理を行なうこととした。

すなわち、CPU28 は、図 3 に示されるように、未知試料のスペクトル I の形状と基準物識別ライブラリの覚醒剤、麻薬等の基準物の標準スペクトル II の形状を比較し、これらの相関係数を求める。

40

【0027】

そして、最も相関係数の高い標準スペクトルを検索し、未知試料中の基準物が覚醒剤か、麻薬か、あるいはその他かを識別する。

ここで、麻薬と識別された場合は、その麻薬の名前を、例えばコカインか、ヘロインか等を表示する。また、その他の薬剤、例えば風邪薬やうどん粉等と識別された場合は、該当なしと表示する。

【0028】

一方、覚醒剤と識別された場合は、各不純物の特定のピークを用いて、本実施形態において特徴的な検量線から不純物の定量が行われる (S16)。

50

すなわち、本実施形態では、覚醒剤と識別された場合は、図4に示されるように、CPU28は、未知試料のスペクトルデータより覚醒剤(Ma)に含まれるであろう不純物A、例えばアンナカに固有のピーク波数 $\lambda_A$ でのピーク高さ $H_A$ を読み取る。また、基準物(Ma)に固有のピーク波数 $\lambda_S$ でのピーク高さ $H_S$ を読み取り、これらの吸光度比( $H_A / H_S$ )を求める。

#### 【0029】

これを覚醒剤に含まれるであろう他の不純物B,C,D、例えばAp,Ep,DMAについても行なう。

その後、CPU28は、これらの吸光度比を定量ライブラリ36の各不純物の検量線に当てはめて、不純物の濃度を求める。

10

すなわち、前述のようにして得られた不純物Aと基準物Maの吸光度比( $H_A / H_S$ )を、例えば図5(A)に示すような不純物Aの検量線に当てはめ、不純物Aの濃度を求める。

#### 【0030】

また、前述のようにして得られた不純物Bと基準物Maの吸光度比( $H_B / H_S$ )を、例えば同図(B)に示すような不純物Bの検量線に当てはめ、不純物Bの濃度を求める。

また、前述のようにして得られた不純物Cと基準物Maの吸光度比( $H_C / H_S$ )を、例えば同図(C)に示すような不純物Cの検量線に当てはめ、不純物Cの濃度を求める。

#### 【0031】

また、前述のようにして得られた不純物Dと基準物Maの吸光度比( $H_D / H_S$ )を、例えば同図(D)に示すような不純物Dの検量線に当てはめ、不純物Dの濃度を求める。

20

このようにして覚醒剤に含まれるであろう各不純物A,B,C,Dの定量後、CPU28は、前述のようにして得られた定量結果から最多不純物名を検索し、その最多不純物名と定量値を%表示する(S18)。

例えば、図6に示すような結果をディスプレイに表示する。またプリンタで図7に示す結果を印刷することも好ましい。

#### 【0032】

なお、各不純物の定量値が所定の値以下の場合は、100%Ma等と表示することも好ましい。

このように本実施形態では、不純物の定量に、あらかじめMaに含まれるであろう不純物毎に、基準物と不純物を種々の濃度で混合した標準試料を測定して作成しておいた検量線を用いている。

30

#### 【0033】

すなわち、例えばアンナカの定量を行なうには、基準物(Ma)とアンナカを種々の濃度、例えば95対5%、90対10%、85対15%、80対20%、75対25%、70対30%、65対35%、60対40%で混合した各標準試料の吸光度スペクトルを測定し、アンナカの吸光度/Maの吸光度の比を縦軸に、濃度を横軸にとってグラフにしたアンナカの検量線を用いる。

#### 【0034】

また、例えばApの定量を行なうには、基準物(Ma)とApを、例えば前記アンナカと同様の種々の濃度で混合した各標準試料の吸光度スペクトルを測定し、Apの吸光度/Maの吸光度を縦軸に、濃度を横軸にとってグラフにしたApの検量線を用いるのである。つまり、不純物Aの定量を行なうには、Maと不純物Aを種々の濃度で混合した各標準試料の吸光度スペクトルを測定し、不純物Aの吸光度/Maの吸光度の比を縦軸に、濃度を横軸にとってグラフにした不純物Aの検量線を用いるのである。

40

#### 【0035】

この結果、本実施形態では、不純物の濃度が異なる標準試料の標準スペクトルを複数用意しておき、未知試料のスペクトルの形状に最も近い標準スペクトルを検索し、その検索された標準スペクトルに用いられた標準試料中の不純物の濃度を、未知試料中の不純物の濃度とした場合に比較し、より詳細な濃度が得られる。

50

また、本実施形態では、熟練者がスペクトル解析を行った場合に比較し、一の未知試料の中に含まれる複数成分の分類を容易に、かつ正確に行なうことができる。

【0036】

さらに、通常、各成分のピークが重なり合う可能性のある試料を測定する際は、前処理としてカラム等による分離が行われるが、本実施形態のように基準物に含まれる不純物の種類がほぼ特定可能な場合には、カラム等による物理的な分離を行なうことなく、一本のスペクトルデータから自動的に複数成分を容易に分類することが可能となる。

本発明の試料識別装置は、前記各構成に限定されるものではなく、発明の要旨の範囲内で種々の変形が可能である。

【0037】

例えば、前記構成では、基準物として覚醒剤を想定し、覚醒剤に含まれるであろう不純物の識別と定量を行った例について説明したが、他の試料、例えば麻薬の識別、該麻薬に含まれる不純物の識別、定量を行なうようにしてもよい。

また、前記覚醒剤、麻薬等の薬物に限定されず、例えば基準物としてプラスチックを想定し、該プラスチックに含まれる可塑剤等の識別、定量を行なうようにしてもよい。

【0038】

また、前記構成では、基準物、不純物の測定値として吸光度を用いた例について説明したが、本発明の試料識別方法およびその装置は、これに限定されるものではなく、定量可能なものであれば任意のものを用いることができる。例えば、拡散反射光の強度、KM値等を用いることも好ましい。

また、前記構成では、最多不純物名とその濃度を出力した例について説明したが、ディスプレイに表示ないしプリンタに印字する不純物名とその濃度の順番は、例えばCPU28により自由に変更可能であり、例えば濃度の高い順、低い順等というように、表示の順番の並べ替えを行なわせることも好ましい。

【0039】

また、以下に示すような試料識別方法を用いることも好ましい。

第二実施形態

図8には本発明の第二実施形態にかかる試料識別装置の概略構成が示されている。

なお、本実施形態では、基準物として覚醒剤が識別された場合は、濃度の高いと思われる順に不純物の識別と定量を行なう場合について説明する。

また、前記第一実施形態に対応する部分には符号100を加えて示し、説明を省略する。

【0040】

図8において、定量ライブラリ136は、最多不純物用の検量線、次多不純物用の検量線等を記憶している。

ここで、最多不純物用の検量線は、Maと最多不純物との濃度を所定の間隔で変えて調製した標準試料を測定して作成されている。

次多不純物用の検量線は、まず、Maと最多不純物を最多不純物の定量結果に近い混合比で混合した試料を用意し、その試料と次多不純物の混合比を所定の間隔で変えて調製した標準試料を測定して作成されている。

【0041】

そして、未知試料のスペクトル測定後は、図9に示すように、CPU128が、基準物識別ライブラリ133の標準スペクトルの中から、データ記憶手段132の未知試料のスペクトル形状と最も高い相関を示すものを選び、未知試料の基準物が覚醒剤か、麻薬か、あるいはその他かを識別する(S114)。

ここで、覚醒剤が識別された場合は、CPU128は、未知試料のスペクトルデータより各不純物に固有のピーク波数でのピーク強度を読み取り、その最大ピーク強度の大小により最多不純物の定量と識別を行なう(S120)。

【0042】

1 最多不純物の識別後、その定量を前記最多不純物用の検量線を用いて行なう。

その後、CPU128は、未知試料のスペクトルデータからその他の不純物に固有のピー-

10

20

30

40

50

ク波数でのピーク強度を読み取り、次多不純物の識別を行なう。

2 次多不純物の識別後、その定量を前記次多不純物用の検量線を用いて行なう。

なお、本実施形態では、基準物としての Ma を X、不純物を濃度の高いと思われる順に A、B、C、D と仮定した場合は、以下の検量線を用いる。

【0043】

1 最多不純物 A の検量線

$X + (5\%)A$  ,

•

$X + (A \text{ の混合比を } 5\% \text{ 間隔で変えたもの})$

•

$X + (40\%)A$

の標準試料を測定して作成された検量線を用いる。

【0044】

2 次多不純物 B の検量線

前記不純物 A の定量値が 4 % とした場合、標準試料中の A の濃度を前記定量結果の 4 % に最も近い 5 % に固定して

$X + 5\%A + (5\%)B$  ,

•

$X + 5\%A + (B \text{ の混合比を } 5\% \text{ 間隔で変えたもの})$

•

$X + 5\%A + (40\%)B$

の標準試料を測定して作成された検量線を用いる。

【0045】

3 次多不純物 C の検量線

前記不純物 B の定量値が 9 % とした場合、標準試料中の A の濃度を前記定量結果の 4 % に最も近い 5 %、B の濃度を前記定量結果の 9 % に最も近い 10 % に固定して

$X + 5\%A + 10\%B + (5\%)C$  ,

•

$X + 5\%A + 10\%B + (C \text{ の混合比を } 5\% \text{ 間隔で変えたもの})$

•

$X + 5\%A + 10\%B + (40\%)C$

の標準試料を測定して作成された検量線を用いる。

【0046】

そして、このような工程を所望の回数、例えば最少不純物の定量を終えるまで、前記 S 120 の処理を繰り返す。

この結果、本実施形態では、未知試料のスペクトルから各不純物に固有のピーク強度から各不純物の濃度を予測し、濃度順に不純物の識別と定量を行なうことができる。

また、不純物の定量は、前段までの不純物をほぼ同様に近い割合で含み、定量を行なう不純物の割合を変えて調製した各標準試料から作成された検量線を用いるので、不純物の定量がより詳細に行える。

【0047】

さらに、前記第一実施形態と同様、カラム等の物理的な分離を行なうことなく、一本のスペクトルデータから未知試料の中に含まれる複数成分を自動的に分類でき、第二実施形態では、さらに複数成分の階層化が自動的に可能となる。

したがって、そのような表示方法の工夫をしないで、単に成分名とその濃度値を横並びや一覧で表示した場合に比較し、検索結果が見やすいものとなる。

【0048】

【発明の効果】

以上説明したように本発明にかかる試料識別方法および装置によれば、不純物定量工程(手段)により、あらかじめ基準物に含まれるであろう不純物毎に、基準物と不純物を種々

10

20

30

40

50

の濃度で混合した標準試料を測定して作成しておいた検量線に、測定工程（手段）で得た測定結果を当てはめ、基準物識別工程（手段）で識別された基準物に含まれるであろう不純物の定量を行ない、不純物識別工程（手段）により、定量工程（手段）で得た定量結果に基づいて基準物識別工程（手段）で識別された基準物に含まれるであろう不純物の識別を行なうこととしたので、未知試料中の基準物の識別、並びに該基準物に含まれる不純物の識別及び定量を容易に且つ正確に行える。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の第一実施形態にかかる試料識別装置の概略構成の説明図である。

【図2】図1に示した装置での処理内容を示すフローチャートである。

【図3】図1に示した装置での基準物識別工程の説明図である。

10

【図4】図1に示した装置での不純物定量工程の説明図である。

【図5】図1に示した装置での不純物定量工程の説明図である。

【図6】図1に示した装置で得られた検索結果の画面表示例である。

【図7】図1に示した装置で得られた検索結果の印刷例である。

【図8】本発明の第二実施形態にかかる試料識別装置の概略構成の説明図である。

【図9】図8に示した装置での処理内容を示すフローチャートである。

【符号の説明】

10, 110...試料識別装置

14, 114...測定手段

28, 128...CPU（基準物識別手段、不純物定量手段、不純物識別手段）

20

32, 132...データ記憶手段

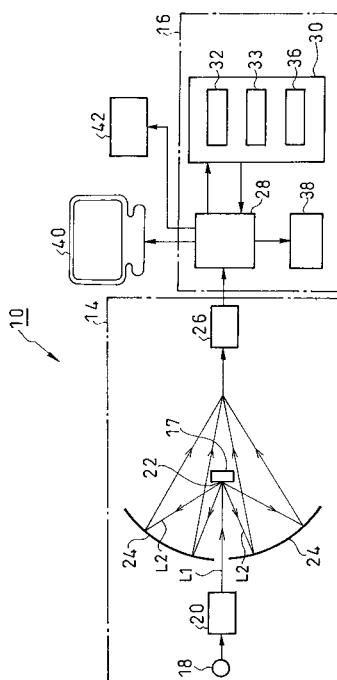
33, 133...基準物識別ライブラリ

36, 136...定量ライブラリ

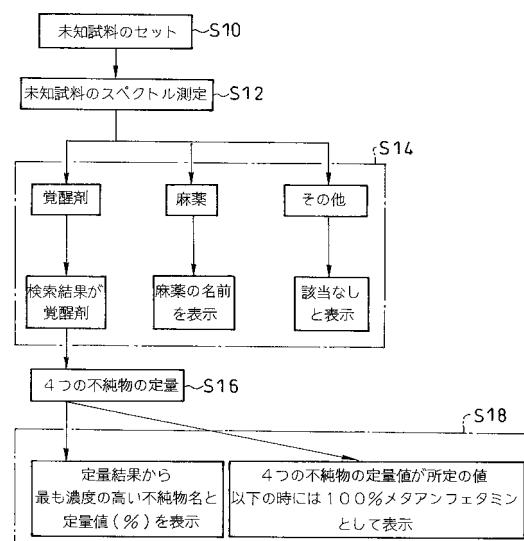
40, 140...ディスプレイ

42, 142...プリンタ

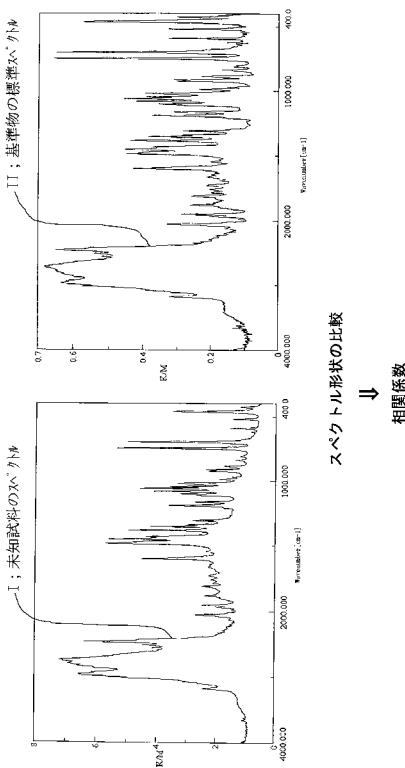
【図1】



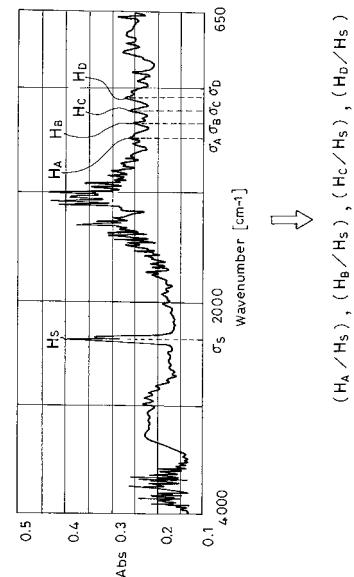
【図2】



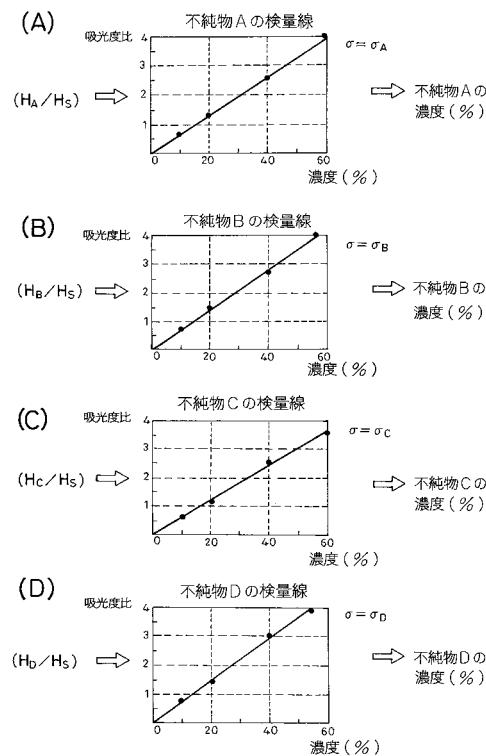
【図3】



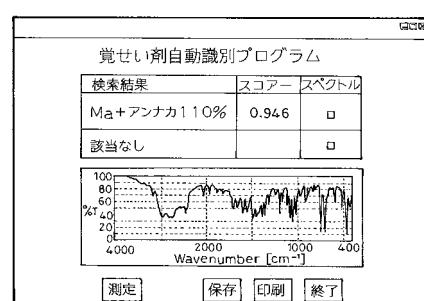
【図4】



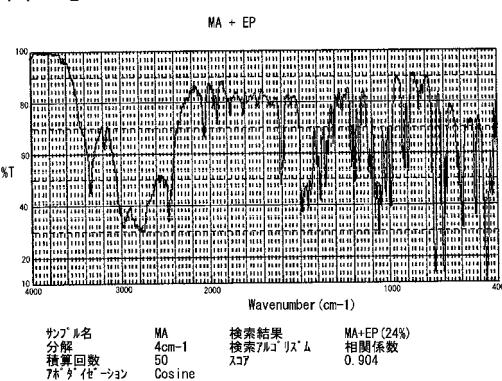
【図5】



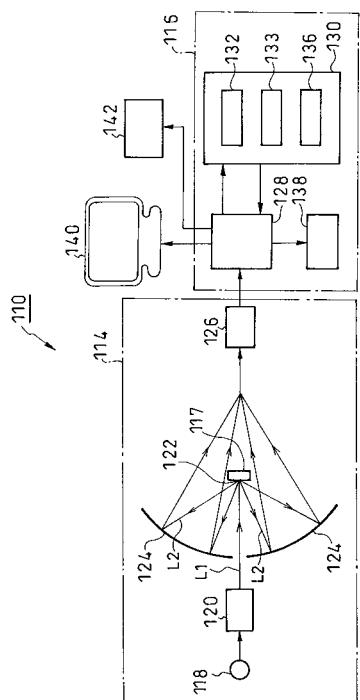
【図6】



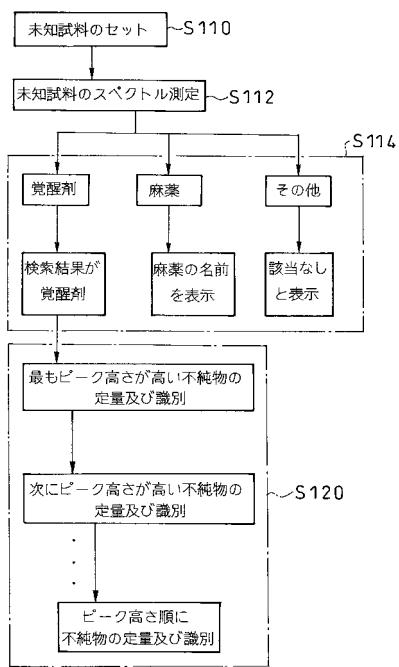
【図7】



【図8】



【図9】



---

フロントページの続き

審査官 島田 英昭

(56)参考文献 特開平09-297062 (JP, A)  
特開平09-288056 (JP, A)  
特開平05-180759 (JP, A)  
特開平07-260682 (JP, A)  
特開平09-218153 (JP, A)  
特開平06-088793 (JP, A)  
特表2001-525054 (JP, A)  
特開平10-038807 (JP, A)  
特開平09-119897 (JP, A)  
特開平04-151545 (JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G01N21/17-21/61

JSTPlus(JDreamII)