

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第6259816号
(P6259816)

(45) 発行日 平成30年1月10日(2018.1.10)

(24) 登録日 平成29年12月15日(2017.12.15)

(51) Int.Cl.

F I

G O 1 N 21/552 (2014.01)

G O 1 N 21/552

請求項の数 15 (全 18 頁)

(21) 出願番号	特願2015-509137 (P2015-509137)	(73) 特許権者	509027021
(86) (22) 出願日	平成25年4月25日(2013.4.25)		サーモ エレクトロン サイエнтиフィ
(65) 公表番号	特表2015-515011 (P2015-515011A)		ック インストルメンツ リミテッド ラ
(43) 公表日	平成27年5月21日(2015.5.21)		イアビリティ カンパニー
(86) 国際出願番号	PCT/US2013/038204		アメリカ合衆国 ウィスコンシン州 53
(87) 国際公開番号	W02013/163420		711 マディソン ヴェローナ ロード
(87) 国際公開日	平成25年10月31日(2013.10.31)		5225
審査請求日	平成28年4月22日(2016.4.22)	(74) 代理人	100092093
(31) 優先権主張番号	13/458,000		弁理士 辻居 幸一
(32) 優先日	平成24年4月27日(2012.4.27)	(74) 代理人	100082005
(33) 優先権主張国	米国 (US)		弁理士 熊倉 禎男
		(74) 代理人	100088694
			弁理士 弟子丸 健
		(74) 代理人	100095898
			弁理士 松下 満

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 内蔵ATR及び付属品区画を有する分光計

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

ベースプレートと、
 前記ベースプレートに搭載され、光を送るように構成された光源と、
 前記ベースプレートに搭載され、前記光源から光を受け取り、変調光を出力する干渉計と、
 試料分析付属装置を受け入れるように構成された付属品区画であって、
 前記ベースプレートから延び、第1の光を受け入れるように構成された第1の光ポートを備えた、第1の壁、
 前記ベースポートから延びる第2の壁、及び
 前記ベースプレートから、前記第1の壁と前記第2の壁との間に延びる第3の壁、を備えた、付属品区画と、
 前記ベースプレートに搭載され、前記第1の壁によって前記付属品区画から隔てられ、試料の減衰全反射分析を実行するように構成された、試料分析装置であって、
 第2の光を受け取るように構成された結晶、
 前記結晶に前記試料を押しつけるように構成された先端、及び
 前記第2の光が前記結晶内で反射した後の第3の光を検出するように構成された検出器、を備えた、試料分析装置と、
 前記ベースプレートに搭載され、前記変調光を受け取り、前記第1の光ポートに向けて反射して、前記第1の光を形成するように構成された第1の光学要素と、

10

20

前記ベースプレートに搭載された第2の光学要素と、

前記第2の光学要素に搭載され、前記第2の光学要素を第1の位置と第2の位置との間で移動させるように構成されたアクチュエータであって、前記第1の位置において、前記第2の光学要素は、前記変調光を受け取り、前記変調光を前記結晶に向けて反射して、前記第1の光学要素が前記変調光を受け取らないように、前記第2の光を形成するように構成され、更に、前記第2の位置において、前記第2の光学要素は前記変調光を受け取らない、アクチュエータと、
を備えた、分光計。

【請求項2】

前記第2の壁は、受け入れられた前記第1の光から形成される第4の光を受け入れるように構成された第2の光ポートを備えた、請求項1に記載の分光計。

10

【請求項3】

複数の検出器と、

前記第2の光ポートを通して受け入れられた前記第4の光を受け取るように構成された第3の光学要素と、

前記ベースプレートに搭載され、前記第3の光学要素を複数の位置の間で移動させるように構成された第2のアクチュエータであって、前記複数の位置の各位置において、前記第3の光学要素は、受け取った前記第4の光を、前記複数の検出器のうちの1つの検出器に向けて反射するように構成された、第2のアクチュエータと、
を更に備えた、請求項2に記載の分光計。

20

【請求項4】

前記検出器は、検出器要素と、ダイヤモンド窓と、を備え、

前記ダイヤモンド窓は、前記検出器要素が、前記ダイヤモンド窓を透過した後の前記第3の光を受け取れるように位置決めされている、請求項1に記載の分光計。

【請求項5】

前記試料分析装置は、前記第2の光学要素から前記変調光を受け取り、前記変調光を前記結晶に向けて更に反射するように構成された第3の光学要素を更に備えた、請求項1に記載の分光計。

【請求項6】

前記試料分析装置は、前記第3の光学要素から前記変調光を受け取り、前記変調光を前記結晶に向けて更に反射するように構成された第4の光学要素を更に備えた、請求項5に記載の分光計。

30

【請求項7】

前記試料分析装置は、前記結晶内で反射された後の前記第3の光を受け取り、前記第3の光を前記検出器に向けて更に反射するように構成された第5の光学要素を更に備えた、請求項6に記載の分光計。

【請求項8】

前記第3の光学要素は放物面鏡であり、前記第4の光学要素は第1の楕円鏡であり、前記第5の光学要素は第2の楕円鏡である、請求項7に記載の分光計。

【請求項9】

40

前記第1の壁は、

前記第1の壁に搭載されたパージシャッタ板と、

前記パージシャッタ板に搭載され、前記パージシャッタ板を第1の位置と第2の位置との間で移動させるように構成された第2のアクチュエータと、を更に備え、

前記第1の位置では、前記パージシャッタ板は、前記第1の光ポートによる第1の光の受け入れを遮蔽し、前記付属品区画を前記試料分析装置から遮断するように構成され、更に、前記第2の位置では、前記パージシャッタ板は、前記第1の光ポートを遮蔽解除するように構成された、請求項1に記載の分光計。

【請求項10】

前記光源は、

50

可視光スペクトル内の第 1 の波長を略中心とした第 1 の光を発するように構成された第 1 の光源と、

赤外線光スペクトル内の第 2 の波長を略中心とした第 2 の光を発するように構成された第 2 の光源と、を備えた、請求項 1 に記載の分光計。

【請求項 1 1】

前記ベースプレートに搭載され、前記干渉計から前記変調光を受け取り、前記変調光を前記第 1 の光学要素に向けて更に反射するように構成された第 3 の光学要素を更に備えた、請求項 1 に記載の分光計。

【請求項 1 2】

前記ベースプレートから延びる第 1 の分光計壁と、

前記第 1 の分光計壁に搭載された第 1 の放射ポートと、

前記ベースプレートに搭載されたプレートと、

前記プレートに搭載された第 4 の光学要素と、

前記第 4 の光学要素に搭載され、前記第 4 の光学要素を第 1 の位置と第 2 の位置との間で移動させるように構成された第 2 のアクチュエータであって、前記第 1 の位置では、前記第 4 の光学要素は、前記第 3 の光学要素からの前記変調光を遮り、前記遮った光を前記第 1 の放射ポートに向けて反射して、前記遮った光を前記ベースプレートによって画定される前記分光計の外部に向けるように構成され、前記第 2 の位置では、前記第 4 の光学要素は、前記第 3 の光学要素からの前記変調光を遮らない、第 2 のアクチュエータと、を更に備えた、請求項 1 1 に記載の分光計。

【請求項 1 3】

前記ベースプレートに搭載された第 5 の光学要素と、

前記ベースプレートに搭載され、光を前記光源から受け取り、受け取った前記光を前記第 5 の光学要素に送るように構成されたアパーチャと、を更に備え、

前記第 5 の光学要素は、前記アパーチャから光を受け取り、受け取った前記光を前記干渉計に向けて反射するように構成された、請求項 1 2 に記載の分光計。

【請求項 1 4】

前記ベースプレートから延びる第 2 の分光計壁と、

前記第 2 の分光計壁内に搭載された第 2 の放射ポートと、

前記プレートに搭載された第 5 の光学要素であって、前記第 4 の光学要素に隣接して、前記第 4 の光学要素の面に対して約 90 度の角度で搭載される、第 5 の光学要素と、を更に備え、

前記第 2 のアクチュエータは、前記第 5 の光学要素に更に搭載され、前記第 5 の光学要素を第 1 の位置と第 2 の位置との間で移動するように構成され、前記第 1 の位置において、前記第 5 の光学要素は、前記第 3 の光学要素からの前記変調光を遮り、遮った前記光を前記第 2 の放射ポートに向けて反射して、遮った前記光を、前記ベースプレートによって画定される前記分光計の外部に向けるように構成され、前記第 2 の位置において、前記第 5 の光学要素は、前記第 3 の光学要素からの前記変調光を遮らない、請求項 1 2 に記載の分光計。

【請求項 1 5】

前記ベースプレートに搭載された第 6 の光学要素と、

前記ベースプレートに搭載され、前記光源から光を受け取り、受け取った前記光を前記第 6 の光学要素に向けて送るように構成されたアパーチャと、を更に備え、

前記第 6 の光学要素は、前記アパーチャから光を受け取り、受け取った前記光を前記干渉計に向けて反射するように構成された、請求項 1 4 に記載の分光計。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

フーリエ変換赤外線 (F T I R) 分光計は、試料の化学組成の正確で効率的な識別の実行に利用される。そのような分光計は通常、ビームスプリッタと、可動式ミラーとを有す

10

20

30

40

50

るマイケルソン干渉計等の干渉計を組み込む。干渉計は、ソースからのビームを変調して、様々な波長での放射線の強度が可変の出力ビームを提供する。光は、近紫外線（UV）、可視（Vis）、近赤外線（NIR）、中赤外線（MIR）、及び／又は遠赤外線（FIR）波長範囲内にあり得、したがって、赤外線スペクトル領域に限定されない。出力ビームはフォーカスされ、試料を透過するか、又は試料から反射され、その後、ビームは集められ、検出器にフォーカスされる。検出器は、時間可変出力信号を提供し、出力信号は、試料の吸収又は反射の波長に関する情報を含む。例えば、1つ又は複数の波長の出力光の強度は、1つ又は複数の波長の入力光の強度と比較されて、吸収率、透過率、蛍光性、反射率等の試料の特徴を特定する。フーリエ分析が出力信号データに対して実行されて、試料内の構成要素の識別情報、それぞれの相対濃度、及び可能な場合には試料の他の特徴 10 についての情報を提供する測定特徴をもたらす。

【背景技術】

【0002】

従来のFTIR分光計は試料チャンバを含み、試料チャンバ内で、試料は所定位置に保持されて、干渉計からの光に露出される。試料は様々な物理的状態、すなわち、液体、固体、又は気体をとることができ、固体試料は様々な物理的特徴を有し得る。例えば、分析すべき固体材料は、材料（例えば、ポリマープラスチック）の塊若しくはシートの形態、粉体若しくは粒状の形態、又は特定形態の形状（例えば、薬物錠剤、ピル、及びカプセル）であり得る。

【0003】

多機能FTIR分光計は、液体及び粉体並びに薬物ピル及びタブレット等の成形された固体試料を含め、様々な試料に対して透過測定、反射測定、又はこれら両方を実行する。分光計を変更せず、試料区画及び試料ホルダの追加又は再構成なしで、同じ分光計システムを利用して、様々な試料をテストすることができる。分光計は、透過又は反射測定システム内に構成される複数の試料ホルダを含む。

【0004】

減衰全反射（ATR）は、試料を、更なる準備なしで固体、液体、又は気体の状態で直接検査できるようにする、赤外線分光法と組み合わせて使用されるサンプリング技法である。ATRはエバネセント波を生成する全内部反射の属性を使用する。光は、試料に接触する内面から少なくとも1回反射するように結晶を透過する。この反射は試料内に延びるエバネセント波を生成する。試料への侵入深度は、光の波長、入射角、並びに結晶及び調べられている媒体の屈折率によって決まる。反射の回数は、入射角を変更することによって変更し得る。ビームは、結晶を出る際に検出器によって集められる。ATR結晶の材料例としては、ゲルマニウム、セレン化亜鉛、及びダイヤモンドが挙げられる。

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

【0005】

例示的な一実施形態では、試料を分析する分光計が提供される。分光計は、ベースプレート、光源、干渉計、付属品区画、試料分析装置、第1の光学要素、第2の光学要素、及びアクチュエータを備えるが、これらに限定されない。光源は、ベースプレートに搭載され、光を送るように構成される。干渉計は、ベースプレートに搭載され、光源から光を受け取り、変調光を形成する。付属品区画は、試料分析付属装置を受け入れるように構成され、ベースプレートから延びる第1の壁、第2の壁、及び第3の壁を含む。第3の壁は、第1の壁と第2の壁との間に延びる。第1の壁は、第1の光を受け入れるように構成される第1の光ポートを含む。試料分析装置は、ベースプレートに搭載され、付属品区画から第1の壁によって隔てられる。試料分析装置は、試料の減衰全反射分析を実行するように構成され、第2の光を受け取るように構成される結晶と、試料を結晶に押しつけるように構成される先端と、結晶内での第2の光の反射後の第3の光を検出するように構成される検出器とを含む。第1の光学要素は、ベースプレートに搭載され、変調光を受け取り、変調光を第1の光ポートに向けて反射して、第1の光を形成するように構成される。第2の 40 50

光学要素はベースプレートに搭載される。アクチュエータは、第2の光学要素に搭載され、第2の光学要素を第1の位置と第2の位置との間で移動させるように構成される。第1の位置では、第2の光学要素は、変調光を受け取り、第1の光学要素が変調光を受け取らないように変調光を結晶に向けて反射して、第2の光を形成するように構成される。第2の位置では、第2の光学要素は変調光を受け取らず、それにより、第1の光学要素が変調光を受け取るのを遮らない。

【0006】

本発明の他の原理的特徴及び利点が、以下の図面、詳細な説明、及び添付の特許請求の範囲を検討することから、当業者に明らかになるであろう。

【0007】

本発明の例示的な実施形態について、同様の符号が同様の要素を示す添付図面を参照して以下に説明する。

【図面の簡単な説明】

【0008】

【図1】例示的な一実施形態による分光計システムのブロック図を示す。

【図2】例示的な一実施形態による分光計の斜視図を示す。

【図3】付属品区画を覆うカバープレートがない状態の図2の分光計の右側斜視図を示す。

【図4】付属品区画を覆うカバープレートがない状態の図2の分光計の左側斜視図を示す。

【図5】いかなるカバープレートもない図2の分光計の上面図を示す。

【図6】例示的な一実施形態による図2の分光計のベンチ区画の一部の側面図を示す。

【図7】例示的な一実施形態による図2の分光計のATR区画の上面図を示す。

【図8】例示的な一実施形態による図7のATR区画の左側面図を示す。

【図9】例示的な一実施形態による、ダウン位置でのフリップミラーを有する図7のATR区画の背面図を示す。

【図10】例示的な一実施形態による、アップ位置でのフリップミラーを有する図7のATR区画の背面図を示す。

【図11】例示的な一実施形態による図7のATR区画の複数の区画の後部底面斜視図を示す。

【図12】例示的な一実施形態による図7のATR区画の複数の区画の左側底面斜視図を示す。

【図13】例示的な第2の実施形態による図2の分光計のベンチ区画の一部の上面図を示す。

【図14】いかなるカバープレートもない図13の分光計の上面図を示す。

【図15】第3の例示的な実施形態による図2の分光計のベンチ区画の一部の上面図を示す。

【図16】いかなるカバープレートもない図15の分光計の上面図を示す。

【発明を実施するための形態】

【0009】

当業者に理解されるように、フーリエ変換赤外線（FTIR）分光計とは、個々の各スペクトル範囲で吸収されるエネルギー量を記録する代わりに、スペクトル全体にわたるエネルギーが単一の検出器によって収集される測定技法である。光源は広帯域赤外線エネルギーを放射し、このエネルギーは、マイケルソン干渉計等の干渉計に向けられ、干渉計は光を分割する。干渉計から出た光は、試料分析装置の試料区画に向けられる。光は、試料と相互作用し、試料分析装置によって実行される分析のタイプに応じて、試料の表面を透過するか、又は試料の表面から反射される。試料区画を出た後、光は検出器に達し、測定されて、試料分析信号を生成する。フーリエ変換を使用して、試料分析信号は、周波数領域から時間領域に変換され、試料についてのスペクトル情報が得られる。通常、FTIR分光計は、干渉計の内部較正用のレーザを含む。

【 0 0 1 0 】

図 1 を参照して、例示的な一実施形態による分光計システム 1 0 0 のブロック図を示す。例示的な実施形態では、分光計システム 1 0 0 は、分光計 1 0 2 と、分光計 1 0 2 を接続し得るインタフェース計算装置 1 2 0 とを含み得る。分光計 1 0 2 はインタフェース計算装置 1 2 0 に接続する必要はない。接続される場合、分光計 1 0 2 及びインタフェース計算装置 1 2 0 は、直接又はネットワークを介して接続し得る。ネットワークは、セルラネットワーク、ローカルエリアネットワーク、インターネット等の広域ネットワーク等を含む任意のタイプの有線及び／又は無線の公衆又は私設のネットワークであり得る。分光計 1 0 2 は、インタフェース計算装置 1 2 0 と情報を送受信し得る。例えば、分光計 1 0 2 は、試料について得られた結果を、インタフェース計算装置 1 2 0 に記憶するために送信し得る。別の例として、分光計 1 0 2 は、インタフェース計算装置 1 2 0 からソフトウェアアップデートを受信し、且つ／又はインタフェース計算装置 1 2 0 からコマンドを受信し得る。コマンドは、分光計 1 0 2 の 1 つ又は複数の構成要素の動作を制御し得る。インタフェース計算装置 1 2 0 は、個人情報端末、デスクトップコンピュータ、ラップトップコンピュータ、統合メッセージング装置、セルラ電話、スマートフォン、ページャ等であるが、これらに限定されない任意のフォームファクタの計算装置を含み得る。

10

【 0 0 1 1 】

分光計 1 0 2 は、入力インタフェース 1 0 4、ボタン 1 0 6、出力インタフェース 1 0 8、ディスプレイ 1 1 0、コンピュータ可読媒体 1 1 2、制御アプリケーション 1 1 4、通信インタフェース 1 1 6、及びプロセッサ 1 1 8 を含み得る。異なる構成要素及び追加の構成要素を分光計 1 0 2 に組み込み得る。入力インタフェース 1 0 4 は、当業者に既知のように、分光計 1 0 2 に入力するために、ユーザからの情報を受信するインタフェースを提供する。入力インタフェース 1 0 4 は、キーボード、ペン及びタッチスクリーン、マウス、トラックボール、タッチスクリーン、キーパッド、ボタン 1 0 6 を含む 1 つ又は複数のボタン等を含むが、これらに限定されない様々な入力技術を使用して、ユーザが情報を分光計 1 0 2 に入力できるようにするか、又はディスプレイ 1 1 0 に表示されるユーザインタフェースに提示される選択を行えるようにし得る。分光計 1 0 2 は、同じ又は異なる入力インタフェース技術を使用する 1 つ又は複数の入力インタフェースを有し得る。

20

【 0 0 1 2 】

出力インタフェース 1 0 8 は、分光計 1 0 2 のユーザによるレビューのために情報を出力するインタフェースを提供する。例えば、出力インタフェース 1 0 8 は、ディスプレイ 1 1 0、スピーカ、プリンタ等へのインタフェースを含み得る。ディスプレイ 1 1 0 は、薄膜トランジスタディスプレイ、発光ダイオードディスプレイ、液晶ディスプレイ、又は当業者に既知の様々な異なる任意のディスプレイであり得る。分光計 1 0 2 は、同じ又は異なるインタフェース技術を使用する 1 つ又は複数の出力インタフェースを有し得る。同じインタフェースが、入力インタフェース 1 0 4 及び出力インタフェース 1 0 8 の両方をサポートし得る。例えば、タッチスクリーンでは、ユーザ入力を可能にするとともに、出力をユーザに提示する。通信インタフェース 1 1 6 を通して、分光計 1 0 2 はディスプレイ 1 1 0、スピーカ、及び／又はプリンタにアクセス可能であり得る。

30

【 0 0 1 3 】

コンピュータ可読媒体 1 1 2 は、当業者に既知のように、プロセッサ 1 1 8 が情報にアクセスできるような情報の電子保持場所又は記憶場所である。コンピュータ可読媒体 1 1 2 は、磁気記憶装置（例えば、ハードディスク、フロッピーディスク、磁気ストリップ）、光ディスク（例えば、CD、DVD、...）、スマートカード、フラッシュメモリデバイス等の任意のタイプのランダムアクセスメモリ（RAM）、任意のタイプの読み取り専用メモリ（ROM）、任意のタイプのフラッシュメモリ等を含むことができるが、これらに限定されない。分光計 1 0 2 は、同じ又は異なるメモリ媒体技術を使用する 1 つ又は複数のコンピュータ可読媒体を有し得る。分光計 1 0 2 は、CD又はDVD等のメモリ媒体のロードをサポートする 1 つ又は複数のドライブを有することもできる。

40

【 0 0 1 4 】

50

通信インタフェース 116 は、当業者に既知の様々なプロトコル、伝送技術、及び媒体を使用して、装置間でデータを送受信するインタフェースを提供する。通信インタフェース 116 は、有線又は無線であり得る様々な伝送媒体を使用して通信をサポートし得る。分光計 102 は、同じ又は異なる通信インタフェース技術を使用する 1 つ又は複数の通信インタフェースを有し得る。データ及びメッセージは、通信インタフェース 116 を使用して分光計 102 と赤外線計算装置 124 との間で転送し得る。

【0015】

プロセッサ 118 は、当業者に既知のように命令を実行する。命令は、専用コンピュータ、論理回路、又はハードウェア回路によって実行し得る。したがって、プロセッサ 118 は、ハードウェア、ファームウェア、又はこれらの方法の任意の組み合わせ及び/又はソフトウェアとの組み合わせで実施し得る。「実行」という用語は、アプリケーションを実行するか、又は命令によって要求される動作を実行するプロセスである。命令は、1 つ又は複数のプログラミング言語、スクリプト言語、アセンブリ言語等を使用して書くことができる。プロセッサ 118 は命令を実行し、これは、その命令によって要求される動作を実行/制御することを意味する。プロセッサ 118 は、出力インタフェース 108、入力インタフェース 104、コンピュータ可読媒体 112、及び通信インタフェース 116 に動作可能に結合して、情報を受信、送信、及び処理する。プロセッサ 118 は、永続的なメモリ装置から命令のセットを取り出し、命令を実行可能な形態で、一般に RAM の何らかの形態である一時的なメモリ装置にコピーし得る。分光計 102 は、同じ又は異なる処理技術を使用する複数のプロセッサを含み得る。

【0016】

制御アプリケーション 114 は、分光計 102 の動作の制御、保守、更新等に関連付けられた動作を実行する。本明細書に記載される動作の幾つか又は全ては、制御アプリケーション 114 に具現される命令によって制御し得る。動作は、ハードウェア、ファームウェア、ソフトウェア、又はこれらの方法の任意の組み合わせを使用して実施し得る。図 1 の実施形態例を参照すると、制御アプリケーション 114 は、コンピュータ可読媒体 112 に記憶されるソフトウェア（コンピュータ可読命令及び/又はコンピュータ実行可能命令で構成される）で実施され、プロセッサ 118 によりアクセス可能であり、制御アプリケーション 114 の動作を具現する命令を実行する。制御アプリケーション 114 は、1 つ又は複数のプログラミング言語、アセンブリ言語、スクリプト言語等を使用して書くことができる。

【0017】

図 2 を参照して、例示的な一実施形態による分光計 102 の斜視図を示す。分光計 102 の構成要素は、筐体 200 内又は筐体 200 に搭載され、様々な様式で構成し得る。本開示で使用される場合、「搭載」という用語は、接合、合体、接続、関連付け、挿入、懸架、保持、固定、取り付け、締め付け、バインド、貼り付け、セキュア、ボルト締め、ねじ締め、リベット締め、はんだ付け、溶接、接着、フォームオーバー（form over）、レイヤ化、及び他の同様の用語を含む。「上に搭載」及び「に搭載」という語句は、言及された要素の任意の内部又は外部を含む。本明細書で使用される場合、搭載は、言及された構成要素間の直接搭載又は言及される構成要素間の介在構成要素を通しての間接的搭載であり得る。

【0018】

筐体 200 は、分光計 102 の構成要素のうちの 1 つ又は複数の囲む複数の壁を含み得る。例えば、筐体 200 は、ベンチ構成要素上壁 202 と、検出器上壁 204 と、付属品区画上壁 206 と、ATR 区画上壁 208 と、検出器前壁 210 と、付属品区画前壁 212 と、ATR 区画前壁 214 と、左壁 400（図 4 を参照して示される）と、右壁 216 と、ベースプレート 500（図 5 を参照して示される）と、後壁 502（図 5 を参照して示される）とを含み得る。例示的な一実施形態では、入力インタフェース 104、出力インタフェース 108、及び通信インタフェース 116 のインタフェースを具現し得る電気コネクタが、後壁 502 に搭載される。例示的な実施形態では、ボタン 106 が、ATR

区画上壁 208 に搭載され、分光計 102 の動作をオン又はオフにトリガーする。したがって、制御アプリケーション 114 の制御下で、分光計 102 の 1 つ又は複数の構成要素による測定シーケンスの開始をトリガーするボタン 106 の選択により、測定を開始し得る。

【0019】

例示的な実施形態では、ベンチ区画が一般に、ベンチ区画上壁 202、ベースプレート 500、左壁 400、右壁 216、及び後壁 502 の間に收容される。例示的な実施形態では、検出器区画が一般に、検出器上壁 204、ベースプレート 500、左壁 400、ベンチ区画、付属品区画 300 (図 3 を参照して示される)、及び検出器前壁 210 の間に收容される。例示的な実施形態では、付属品区画 300 が一般に、付属品区画上壁 206、フロアプレート 302 (図 3 を参照して示される)、ベンチ区画、検出器区画、ATR 区画、及び付属品区画前壁 212 の間に收容される。例示的な実施形態では、ATR 区画は一般に、ATR 区画上壁 208、ベースプレート 500、ベンチ区画、付属品区画 300、ATR 区画前壁 214、及び右壁 216 の間に收容される。他の区画配置も可能である。例示的な実施形態では、右壁 216 は第 1 の光ポート 218 を含み、検出器前壁 210 は検出器出力ポート 220 を含み、ATR アーム 222 は、ATR アーム 222 が ATR 区画上壁 208 に向かって、及び ATR 区画上壁 208 から離れて回転移動するように、ATR 区画上壁 208 に搭載される。ATR アーム 222 は ATR ノブ 224 を含み得る。

【0020】

図 3 を参照して、例示的な一実施形態による分光計 102 の右側斜視図を示し、付属品区画上壁 206 及び付属品区画前壁 212 が除去されて、付属品区画 300 が示されている。図 4 を参照して、例示的な一実施形態による分光計 102 の左側斜視図を示し、付属品区画上壁 206 及び付属品区画前壁 212 が除去されて、付属品区画 300 が示されている。付属品区画 300 は、付属品区画上壁 206、付属品区画前壁 212、フロアプレート 302、付属品区画左壁 304、付属品区画後壁 306、及び付属品区画右壁 402 (図 4 を参照して示される) によって画定し得る。例示的な実施形態では、付属品区画左壁 304 は第 2 の光ポート 308 を含み、このポートを通して、付属品区画 300 内に搭載される試料分析付属品装置のタイプに応じて、光を付属品区画 300 から検出器区画に提供することができる。示されていないが、付属品区画 300 は 1 つ又は複数の電気コネクタを含み、電気コネクタは、付属品区画 300 内に搭載された試料分析付属品装置に電力を提供し得、付属品区画 300 内に搭載される試料分析付属品装置から信号を受信し得、且つ / 又は付属品区画 300 内に搭載される試料分析付属品装置に信号を送信し得る。信号は、分光計 102 及び / 又はインタフェース計算装置 120 によって送 / 受信し得る。例示的な試料分析付属品装置は、ガスクロマトグラフィ (GC) IR (GC-IR) 装置、近 IR (NIR) 積分球装置、NIR 又は中 IR (MIR) 光ファイバプローブ、熱重量分析 (TGA) 装置、IR 顕微鏡、FT-ラマン装置、拡散反射装置、シングルバウンズ又はマルチバウンズ ATR 装置、シングルバウンズ又はマルチバウンズ水平 ATR (HATR) 装置、正反射率装置、斜入射角反射率装置、超音響装置、液体クロマトグラフィ装置、光弾性変調 (PEM) 装置等を含む。

【0021】

例示的な実施形態では、付属品区画右壁 402 は第 3 の光ポート 404 を含み、このポートを通して、付属品区画 300 内に搭載される試料分析付属品装置のタイプに応じて、光を ATR 区画から付属品区画 300 に提供するとともに、付属品区画 300 から ATR 区画に提供することができる。例示的な実施形態では、左壁 400 は第 4 の光ポート 406 及び第 5 の光ポート 408 を含む。より少数又はより多数の入力ポート及び出力ポートを、分光計 102 の壁に含み得る。第 1 の光ポート 218、第 4 の光ポート 406、及び第 5 の光ポート 408 は、ベースプレート 500 によって画定される分光計 102 の外部から光を受け取るか、又はその外部に光を送る。

【0022】

図5を参照して、例示的な一実施形態による分光計102の上面図を示し、付属品区画前壁212、ベンチ区画上壁202、検出器上壁204、付属品区画上壁206、及びATR区画上壁208は除去されて、分光計102の内部が示されている。例示的な一実施形態では、検出器区画は、複数の検出器と、付属品区画300から光ビーム510を受け取るように位置決めされる光学要素(図示せず)を含む。例えば、例示的な実施形態では、検出器区画は、第1の検出器504、第2の検出器506、及び第3の検出器508を含む。説明のために、第1の検出器504は重水素化硫酸トリグリシン(DTGS)検出器であり得、第2の検出器506は重水素化Lアラニンドーブ硫酸トリグリシン(DLaTGS)検出器であり得、第3の検出器508は窒素冷却水銀カドミウムテルル(MCT)検出器であり得るが、当然、他のタイプの検出器及び他の構成の検出を使用することも可能である。光学要素はアクチュエータに搭載し得、アクチュエータは、受け取った光ビーム510を選択された検出器に反射するように、光学要素を移動させる。アクチュエータを使用して、光学要素の並進移動及び/又は回転移動を制御し得る。本明細書で 사용되는場合、例示的なアクチュエータとしては、電気モータ、サーボ、ステッパ、又は圧電モータ、空気圧アクチュエータ、ガスモータ等が挙げられる。アクチュエータは更に、検出器出力ポート220を通して、受け取った光ビーム510を外部搭載検出器に反射するように光学要素を移動し得る。例示的な一実施形態では、光学要素は楕円鏡である。

【0023】

例示的な一実施形態では、ATR区画はATR512を含み、これは、ATRアーム222と、第3の光ポート404を通して付属品区画300に光ビーム516を反射し/付属品区画300から光ビーム516を受け取るように位置決めされる光学要素514を含む。光学要素514は、ベンチ区画に光ビーム548を反射し/ベンチ区画から光ビーム548を受け取るように更に位置決めし得る。

【0024】

例示的な一実施形態では、ベンチ区画は光源を含み、光源は、試料の分析に選択される1つ又は複数の波長の光を発する複数の光源を含み得る。光源は、紫外線(UV)、可視、IR、NIR、FIR、近UV等で放射し得る。したがって、光源から発せられる光は可視ではないことがある。図5の例示的な実施形態では、光源は第1の光源520及び第2の光源522を含む。説明のために、第1の光源520はIR源であり得、第2の光源522は白色光源であり得る。例示的な一実施形態では、ベンチ区画はラマン検出器524を更に含む。

【0025】

光学要素600(図6を参照して示される)はアクチュエータ(図示せず)に搭載し得、アクチュエータは、第1の光源520又は第2の光源522から受け取った光526をアパーチャ装置528に向けて反射するように、光学要素600を移動させる。アクチュエータを使用して、光学要素600の並進移動及び/又は回転移動を制御し得る。アクチュエータは更に、アパーチャ装置528から受け取った光をラマン検出器524に向けて反射するように、光学要素600を移動し得る。例示的な一実施形態では、光学要素600は楕円鏡である。

【0026】

アクチュエータは更に、アパーチャ装置528から受け取った光を光学要素530に向けて反射するか、又は光学要素530から反射された光を第5の光ポート408に通して受け取るように、光学要素600を移動させ得る。例示的な一実施形態では、光学要素530は放物面鏡である。例示的な一実施形態では、アパーチャ装置528は、分光計102に選択される解像度及びスペクトル範囲に応じて正確なアパーチャサイズを自動的に設定する。アパーチャ装置528は、アイリスアパーチャ及びアイリスフィルタホイールを含み得る。

【0027】

アパーチャ装置528は、光学要素534から光532を受け取る/光学要素534に光532を送る。例示的な一実施形態では、光学要素534は、干渉計538に/から光

10

20

30

40

50

536を反射する放物面鏡である。干渉計538は、動作に選択される試料分析付属品装置のタイプに基づいて選択されるビームスプリッタ540を含む。分光計102は、干渉計538に挿入されるビームスプリッタを自動的に変更する自動ビームスプリッタ交換器を更に含み得る。光学要素542は、光をビームスプリッタ540から受け取り、光544を、ATR区画内に搭載される光学要素514に向けて反射する。例示的な一実施形態では、光学要素542は平面鏡である。光544は、光学要素514に達する前に、検証ホイール546を通り、フィルタリング光548を形成し得る。検証ホイール546は、当業者に理解されるように、Schott NG-11及びNISTトレース可能標準を使用して分光計102をテストするように構成し得る。図6を参照して、例示的な一実施形態による分光計102のベンチ区画の構成要素の側面図を示す。

10

【0028】

図7を参照して、例示的な一実施形態によるATR512の上面図を示す。ATR512は、フリップパーミラー700と、ATRアーム222と、ATRバック702と、プラットフォーム704とを含む。ATRアーム222はベースプレート500に搭載される。ATRバック702は結晶を含む。例えば、例示的な一実施形態では、結晶はダイヤモンドであり、ATRバック702は平行辺プレートである。その結果、例示的な実施形態では、ATR512は、試料のHATR分析を実行するように構成される。他の実施形態では、結晶は、セレン化亜鉛、ゲルマニウム、KRS-5等で形成し得る。プラットフォーム704はATRアーム222に搭載され、略ATR区画上壁208と同一平面にあるように位置決めされる。

20

【0029】

図8を参照して、例示的な一実施形態による、フリップパーミラー700を有するATR512の左側面図を示す。ATR512は、ATRアーム222から延びるATR先端800（図8を参照して示される）と、光学要素802とを更に含む。例示的な一実施形態では、光学要素802は放物面鏡である。図9を参照して、例示的な一実施形態による、フリップパーミラー700を有するATR512の背面図を示す。図10を参照して、例示的な一実施形態による、フリップパーミラー700を有するATR512の背面図を示す。

【0030】

図11を参照して、例示的な一実施形態によるATR512の追加の構成要素の後部背面斜視図を示す。図12を参照して、例示的な一実施形態によるATR512の追加の構成要素の左側底面斜視図を示す。ATR512は、第1の光学要素1102及び第2の光学要素1104を更に含む。例示的な一実施形態では、第1の光学要素1102及び第2の光学要素1104は楕円鏡である。

30

【0031】

ATR512を使用するために、ユーザはATRアーム222をATRバック702から離れて回転させて、ATRバック702上又はATRバック702内の液体又は固体内に試料を配置することができる。例えば、ユーザは、ピペットを使用して、1滴の試料をATRバック702上に配置し得る。ユーザは、液滴をATRバック702に配置した後、ATRアーム222をATRバック702に向けて回転させ得る。次に、ユーザはATRノブ224を回転させて、試料をATR先端800とATRバック702の上面との間でプレスし、それにより、結晶は、当業者に理解されるように、試料に適宜接触する。これらの動作のうちの1つ又は複数は自動化し得る。

40

【0032】

ボタン106を押下した後、フィルタリング光548は、アップ位置に位置決めされたフリップパーミラー700に向けられる。アクチュエータがフリップパーミラー700に搭載され、フリップパーミラー700を、図9に示される第1のダウン位置と、図10に示される第2のアップ位置との間で昇降させる。第1の位置では、フリップパーミラー700はフィルタリング光548を受け取らず、フィルタリング光548は代わりに、光学要素514によって受け取られ、光学要素514はフィルタリング光548を付属品区画300に反射して、光516を形成する。第2の位置では、フリップパーミラー700は、フィルタ

50

リング光 5 4 8 を受け取り、受け取ったフィルタリング光 5 4 8 を光学要素 8 0 2 及び結晶に向けて反射し、それにより、光学要素 5 1 4 がフィルタリング光 5 4 8 を受け取ることも、光 5 1 6 を形成することもないように位置決めされる。

【 0 0 3 3 】

光学要素 8 0 2 は、フリップパーミラー 7 0 0 から反射された光を受け取り、受け取った光を第 1 の光学要素 1 1 0 2 に向けて反射する。第 1 の光学要素 1 1 0 2 は、光学要素 8 0 2 から反射された光を受け取り、受け取った光を A T R パック 7 0 2 の下面 1 2 0 0 (図 1 2 を参照して示される) に向けて反射する。A T R パック 7 0 2 は、特定の角度で高い屈折率を有する光学的に密な結晶で形成される。この内部反射は、結晶の表面を超え、結晶に接触して保持される試料内に延びるエバネセント波を生み出す。このエバネセント波は、結晶表面を超えて試料内に数 μm 突出する。試料がエネルギーを吸収する赤外線スペクトルの領域では、エバネセント波は減衰されるか、又は変更される。エバネセント波からの減衰エネルギーは、結晶の他端部から出て、第 2 の光学要素 1 1 0 4 によって受け取られ、第 2 の光学要素 1 1 0 4 は受け取った光を A T R 検出器 1 1 0 0 に向けて反射する。A T R 検出器 1 1 0 0 は、第 2 の光学要素 1 1 0 4 から反射光を受け取る。A T R 検出器 1 1 0 0 は、受け取った光を、エバネセント波の強度を示す電気信号に変換する。

【 0 0 3 4 】

例示的な一実施形態では、A T R 検出器 1 1 0 0 は、D L a T G S 検出器要素と、光を D L a T G S 検出器要素に届ける窓と、D L a T G S 検出器要素に給電し、信号情報を抽出する電子回路とを含む。窓は、D L a T G S 検出器要素を保護するとともに、所望のスペクトル範囲にわたり透明である。通常、マルチ範囲 I R を実行するためには、2 つの検出器が必要である：M I R (臭化カリウム (K B r) 窓) 用に 1 つ及び F I R (ポリエチレン窓) 用に 1 つ。例示的な一実施形態では、A T R 検出器 1 1 0 0 の窓はダイヤモンド窓であり、これにより、1 つの検出器を用いて F I R から M I R までの広範囲のスペクトルのデータ収集が可能であり、検出器を交換するか、又は追加のミラーを挿入する必要性をなくす。更に、ダイヤモンド窓は湿度によるダメージを受けにくい。

【 0 0 3 5 】

分光計 1 0 2 の様々な構成要素をプロセッサ 1 1 8 に動作可能に結合して、制御アプリケーション 1 1 4 の制御下で、プロセッサ 1 1 8 から情報を受信し、且つ / 又は情報をプロセッサ 1 1 8 に送信し得る。例えば、プロセッサ 1 1 8 を光源に動作可能に結合して、1 つ又は複数の光源のオン又はオフの切り替えを制御する。プロセッサ 1 1 8 はまた、第 1 の検出器 5 0 4、第 2 の検出器 5 0 6、第 3 の検出器 5 0 8、ラマン検出器 5 2 4、及び A T R 検出器 1 1 0 0 に動作可能に結合して、各検出器によって生成された電子信号を受信し得る。プロセッサ 1 1 8 は更に、言及したアクチュエータに動作可能に結合して、記載された様々な光学要素の移動を制御するとともに、付属品区画 3 0 0 の 1 つ又は複数の壁に搭載されたパーシヤッタを開閉し得る。例えば、パーシヤッタを搭載して、第 2 の光ポート 3 0 8 及び第 3 の光ポート 4 0 4 を覆うことができ、それにより、当業者に理解されるように、分光計 1 0 2 の内部をパーシヤッタすることができる。プロセッサ 1 1 8 は更に、干渉計 5 3 8、検証ホイール 5 4 6、及び / 又はアパーチャ装置 5 2 8 に動作可能に結合して、それぞれの動作を制御し得る。

【 0 0 3 6 】

図 1 3 を参照して、第 2 の例示的な実施形態による分光計 1 0 2 のベンチ区画の構成要素の上面図を示す。図 1 3 の例示的な実施形態では、分光計 1 0 2 は、光学要素 5 4 2 と A T R 5 1 2 との間に位置決めされる第 1 の可動式ミラー装置 1 3 0 0 を更に含み、フィルタリング光 5 4 8 を任意選択的に遮る。第 1 の可動式ミラー装置 1 3 0 0 は、ベースプレート 5 0 0 に搭載された第 1 のプレート 1 3 0 2 と、第 1 のプレート 1 3 0 2 に搭載された第 1 の光学要素 1 3 0 4 と、第 1 のプレート 1 3 0 2 に搭載された第 2 の光学要素 1 3 0 6 と、第 1 のプレート 1 3 0 2 に形成された第 1 のトラック 1 3 0 8 と、第 1 のアクチュエータ 1 3 1 0 とを含み得る。第 1 の光学要素 1 3 0 4 は、第 2 の光学要素 1 3 0 6 に隣接して、第 2 の光学要素 1 3 0 6 の面に対して約 9 0 度の角度で搭載される。分光計

102の外部への光ポートの相対的な向きに応じて、他の構成を使用することもできる。第1のアクチュエータ1310が搭載されて、第1の光学要素1304及び第2の光学要素1306を第1の位置、第2の位置、及び第3の位置の間で第1のトラック1308に沿って移動させる。

【0037】

図14を参照して、第2の例示的な実施形態による分光計102のベンチ区画の構成要素の上面図を示す。第1の位置では、図14に示されるように、第1の光学要素1304は、光学要素542からのフィルタリング光548を遮り、光1400を第4の光ポート406に向けて反射して、光1400を、ベースプレート500によって画定される分光計102の外部に向けるように構成される。第2の位置では、第2の光学要素1306は、光学要素542からのフィルタリング光548を遮り、光1402を第1の光ポート218に向けて反射し、光1402を、ベースプレート500によって画定される分光計102の外部に向けるように構成される。第2の位置では、第2の光学要素1306の面は、図14に示されるように、線1404と位置合わせされる。第3の位置（図示せず）では、第1の光学要素1304も第2の光学要素1306も、光学要素542からのフィルタリング光548を遮らず、フィルタリング光548を光学要素514に引き続き向かわせることができる。図14に更に示されるように、光学要素530は、第5の光ポート408を通して光1404を受け取るか、又は第5の光ポート408を通して光1404を反射するように位置決めされる。

【0038】

図15を参照して、第3の例示的な実施形態による分光計102のベンチ区画の構成要素の上面図を示す。図15の例示的な実施形態では、分光計102は、第2の可動式ミラー装置1500及び第3の可動式ミラー装置1512を更に含む。第2の可動式ミラー装置1500は、光学要素542とATR512との間に位置決めされ、フィルタリング光548を任意選択的に遮る。第3の可動式ミラー装置1512は、アパーチャ装置528と干渉計538との間で光学要素534を置換するように位置決めされる。

【0039】

第2の可動式ミラー装置1500は、ベースプレート500に搭載された第2のプレート1502と、第2のプレート1502に搭載された第4の光学要素1506と、第2のプレート1502に形成された第2のトラック1508と、第2のアクチュエータ1510とを含み得る。第3の光学要素1504はベースプレート500に搭載される。第3の光学要素1504は、第4の光学要素1506の面に対して約90度の角度で搭載されるが、ここでも、分光計102の外部への光ポートの向きに応じて、他の構成が可能である。第2のアクチュエータ1510が搭載されて、第4の光学要素1506を第1の位置と第2の位置との間で、第2のトラック1508に沿って移動させる。第3の可動式ミラー装置1512は、ベースプレート500に搭載された第3のプレート1514と、第3のプレート1514に搭載された第5の光学要素1516と、第3のプレート1514に形成された第3のトラック1518と、第3のアクチュエータ1520とを含み得る。

【0040】

図17を参照して、第3の例示的な実施形態による分光計102のベンチ区画の構成要素の上面図を示す。第3の光学要素1504は、ベースプレート500に固定され、干渉計538から光1600を受け取り、光1602を第4の光ポート406に向けて反射し、ベースプレート500によって画定される分光計102の外部に向けるように位置決めされる。第1の位置では、第4の光学要素1506は、光学要素542からのフィルタリング光548を遮り、光1604を第1の光ポート218に向けて反射し、ベースプレート500によって画定される分光計102の外部に光1604を向けるように構成される。第2の位置では、第4の光学要素1506は、光学要素542からのフィルタリング光548を遮らず、フィルタリング光548を引き続き光学要素514に向かわせることができる。

【0041】

第3のアクチュエータ1520が搭載されて、第5の光学要素1516を第1の位置と第2の位置との間で、第3のトラック1518に沿って移動させる。第1の位置では、第5の光学要素1516は、アパーチャ装置528から光532を受け取り、光536を、光学要素534を参照して上述したように、干渉計538に向けて反射するように構成される。第2の位置では、第5の光学要素1516は、アパーチャ装置528から光536を遮らず、第3の光学要素1504が、干渉計538から光1600を受け取るのを遮らないように位置決めされる。

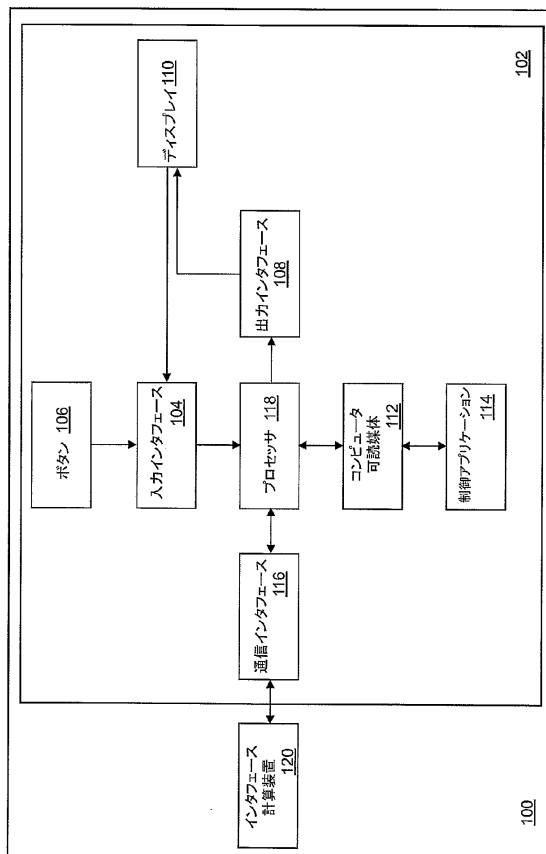
【0042】

本明細書では、「例示的な」という用語は、一例、一事例、又は説明としての役割を意味するために使用される。本明細書において「例示的」として説明されるあらゆる態様又は設計は必ずしも、他の態様又は設計よりも好ましい又は有利なものとして解釈されるべきではない。更に、本開示では、別記される場合を除き、「a」又は「an」は「1つ又は複数」を意味する。更に、「及び」又は「又は」の使用は、別記される場合を除き、「及び／又は」を意味することが意図される。

【0043】

本発明の例示的な実施形態の上記説明は、例示及び説明を目的として提示された。網羅的である、すなわち、本発明を開示される厳密な形態に限定することは意図されず、上記教示に鑑みて変更及び変形が可能であるか、又は本発明の実施から変形及び変形を取得し得る。実施形態は、当業者が本発明を様々な実施形態で、意図される特定用途に合うように様々な変更を行って利用することができるように、本発明の原理を説明するとともに、本発明の実際の適用として選ばれ説明された。本発明の範囲が、本明細書に添付される特許請求の範囲及びそれらの均等物によって規定されることが意図される。

【図1】



【図2】

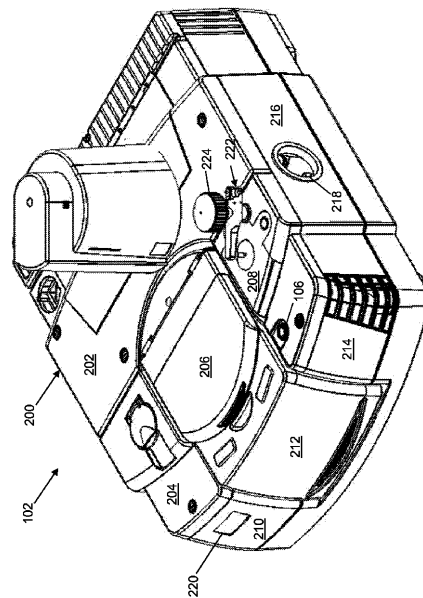


Fig. 2

【図 3】

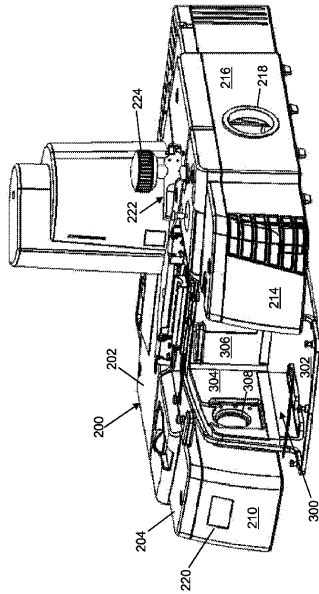


Fig. 3

【図 4】

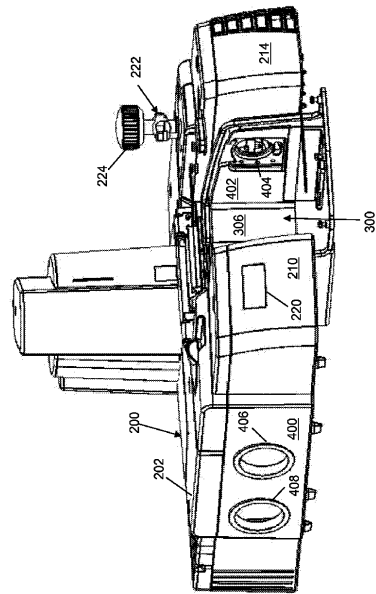


Fig. 4

【図 5】

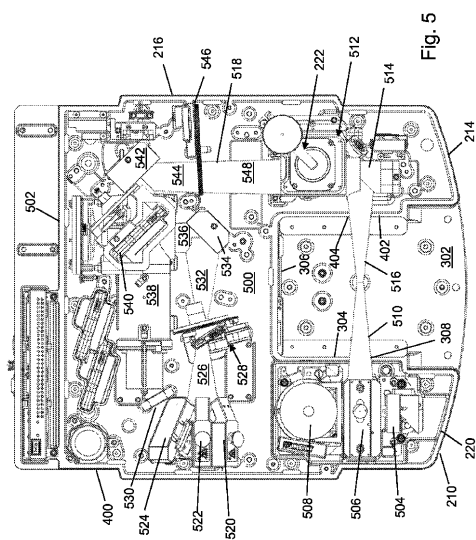


Fig. 5

【図 6】

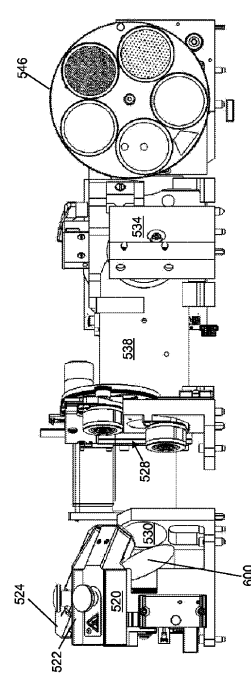


Fig. 6

【図 7】

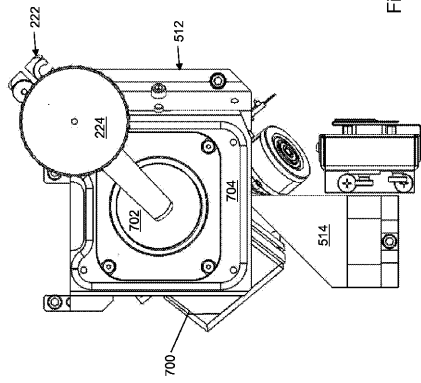


Fig. 7

【図 8】

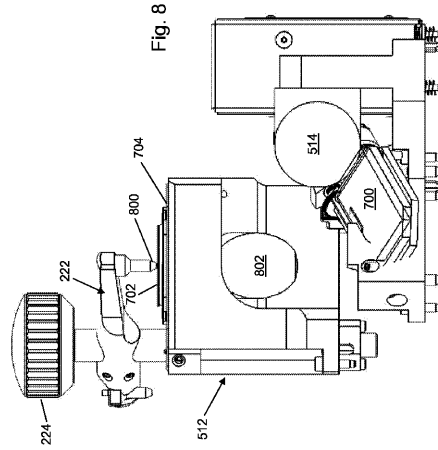


Fig. 8

【図 9】

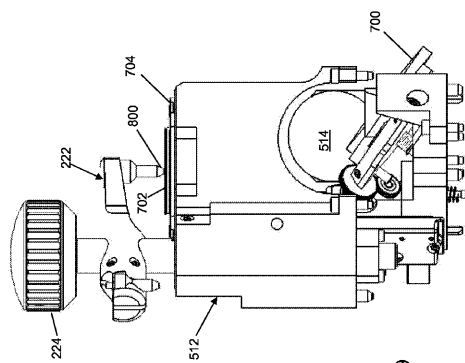


Fig. 9

【図 11】

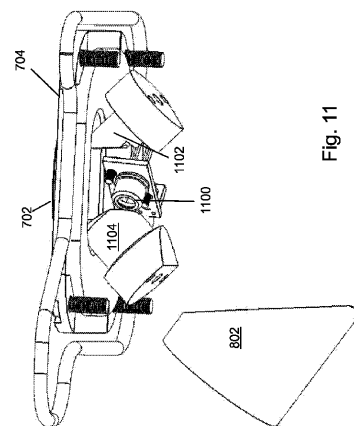


Fig. 11

【図 10】

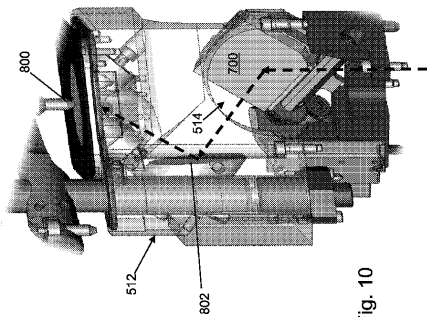


Fig. 10

【図 12】

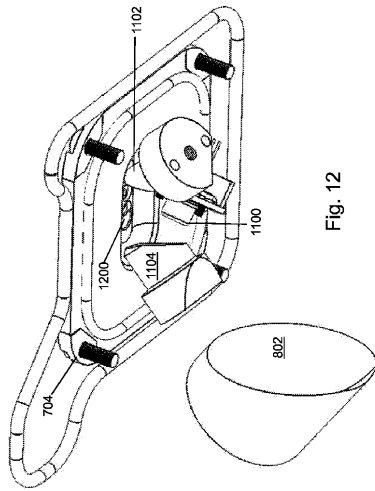


Fig. 12

【図 13】

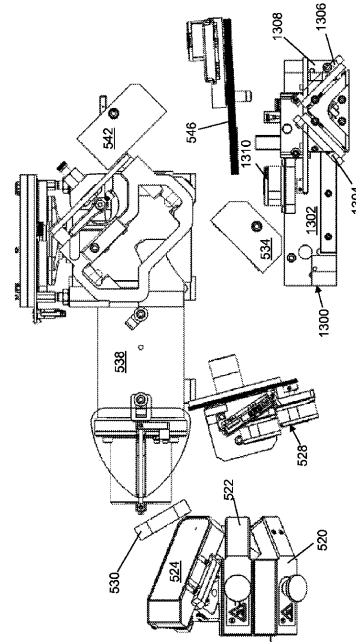


Fig. 13

【図 14】

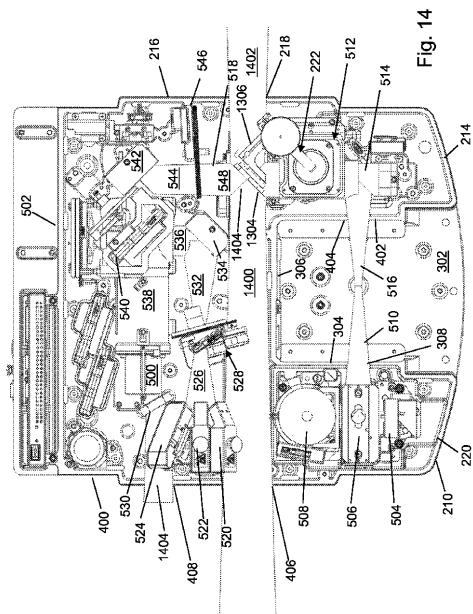


Fig. 14

【図 15】

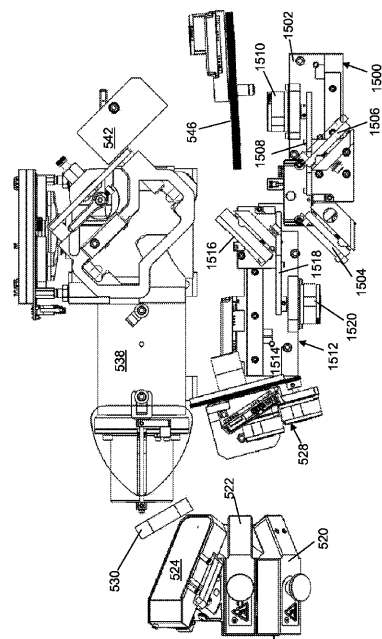
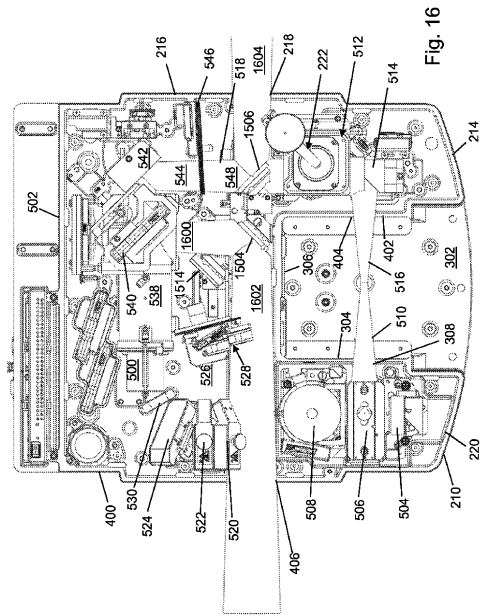


Fig. 15

【図 16】



 フロントページの続き

- (74)代理人 100098475
弁理士 倉澤 伊知郎
- (74)代理人 100130937
弁理士 山本 泰史
- (72)発明者 ブラッドレイ マイケル エス
アメリカ合衆国 ウィスコンシン州 5 3 5 3 4 エジャトン ドウティー ストリート 6 0 6
- (72)発明者 イッジア フェデリコ
アメリカ合衆国 ウィスコンシン州 5 3 5 6 2 ミドルトン シャドー リッジ トレイル 9
6 1 0
- (72)発明者 コフィン ジョン マギー
アメリカ合衆国 ウィスコンシン州 5 3 5 1 7 ブルー マウンズ ノース ロード 3 2 4 5

審査官 小野寺 麻美子

- (56)参考文献 特開 2 0 0 7 - 0 7 8 4 8 7 (J P , A)
特開 2 0 0 9 - 1 6 8 7 1 1 (J P , A)
米国特許出願公開第 2 0 0 9 / 0 1 1 6 0 2 1 (U S , A 1)
米国特許出願公開第 2 0 0 1 / 0 0 3 5 9 5 7 (U S , A 1)

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)

G 0 1 N	2 1 / 0 0	-	G 0 1 N	2 1 / 0 1
G 0 1 N	2 1 / 1 7	-	G 0 1 N	2 1 / 6 1