

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7315088号  
(P7315088)

(45)発行日 令和5年7月26日(2023.7.26)

(24)登録日 令和5年7月18日(2023.7.18)

(51)国際特許分類 F I  
G 0 1 N 21/27 (2006.01) G 0 1 N 21/27 Z  
G 0 1 N 21/64 (2006.01) G 0 1 N 21/64 Z

請求項の数 6 (全15頁)

(21)出願番号	特願2022-501618(P2022-501618)	(73)特許権者	000001993 株式会社島津製作所 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地
(86)(22)出願日	令和2年9月28日(2020.9.28)	(74)代理人	100108523 弁理士 中川 雅博
(86)国際出願番号	PCT/JP2020/036556	(74)代理人	100125704 弁理士 坂根 剛
(87)国際公開番号	WO2021/166310	(74)代理人	100187931 弁理士 澤村 英幸
(87)国際公開日	令和3年8月26日(2021.8.26)	(72)発明者	渡邊 康之 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会社島津製作所内
審査請求日	令和4年8月4日(2022.8.4)	(72)発明者	玉木 隆宏 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会社島津製作所内
(31)優先権主張番号	特願2020-27514(P2020-27514)		
(32)優先日	令和2年2月20日(2020.2.20)		
(33)優先権主張国・地域又は機関	日本国(JP)		

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 光反応評価装置およびフォトン数算出方法

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

試料位置に配置された試料の光反応を評価する光反応評価装置であって、

前記試料位置に光を照射光として照射可能に配置されるとともに、白色光を発生する標準光源に交換可能に設けられた照射光源と、

前記試料位置に光を照射可能に配置された測定光源、および前記試料位置からの光の強度分布を検出するように配置された検出部を含む分光光度計と、

試料が存在しない前記試料位置に前記標準光源により光が照射されかつ前記試料位置に前記測定光源により光が照射されない状態で前記検出部により検出された光の強度分布を第1の検出強度分布として取得し、第1の測定動作時に、試料が存在しない前記試料位置に前記照射光源により光が照射光として照射されかつ前記試料位置に前記測定光源により光が照射されない状態で前記検出部により検出された光の強度分布を第2の検出強度分布として取得する強度分布取得部と、

前記強度分布取得部により取得された第1の検出強度分布、前記強度分布取得部により取得された第2の検出強度分布および前記標準光源の放射特性に基づいて、前記照射光源の照射光の各波長での放射強度を算出する放射強度算出部と、

前記放射強度算出部により算出された各波長での放射強度に基づいて前記照射光源の照射光の各波長でのフォトン数を照射フォトン数として算出する照射フォトン数算出部とを備えた、光反応評価装置。

【請求項2】

第2の測定動作時に、前記試料位置の試料に前記測定光源により光が照射されかつ前記試料位置の試料に前記照射光源により光が照射された状態で前記検出部により検出された光の強度分布を吸光度スペクトルとして取得する吸光度スペクトル取得部と、

前記第2の測定動作時に、前記照射光子数算出部により算出された照射光子数および前記吸光度スペクトル取得部により取得された吸光度スペクトルに基づいて、試料により各波長で吸収された光子の数を吸収光子数として算出する吸収光子数算出部とをさらに備えた、請求項1記載の光反応評価装置。

【請求項3】

前記第1の測定動作時および前記第2の測定動作時より前に、前記強度分布取得部により取得された第1の検出強度分布を記憶する記憶部をさらに備え、

前記強度分布取得部は、前記第1の測定動作時に、前記記憶部に記憶された第1の検出強度分布を取得する、請求項2記載の光反応評価装置。

【請求項4】

前記照射光源として、白色光、単色光または一定波長範囲の光を発生する光源が選択的に設けられる、請求項1または2記載の光反応評価装置。

【請求項5】

試料位置に配置された試料についての光反応を評価する光反応評価装置における光子数算出方法であって、

試料が存在しない前記試料位置に白色光を発生する標準光源により光が照射されかつ前記試料位置に分光光度計の測定光源により光が照射されない状態で前記分光光度計の検出部により検出された光の強度分布を第1の検出強度分布として取得するステップと、

第1の測定動作時に、試料が存在しない前記試料位置に照射光源により光が照射光として照射されかつ前記試料位置に前記測定光源により光が照射されない状態で前記検出部により検出された光の強度分布を第2の検出強度分布として取得するステップと、

前記取得された第1の検出強度分布、前記取得された第2の検出強度分布および前記標準光源の放射特性に基づいて、前記照射光源の照射光の各波長での放射強度を算出するステップと、

前記算出された各波長での放射強度に基づいて前記照射光源の照射光の各波長での光子数を照射光子数として算出するステップとを含む、光子数算出方法。

【請求項6】

第2の測定動作時に、前記試料位置の試料に前記測定光源により光が照射されかつ前記試料位置の試料に前記照射光源により光が照射された状態で前記検出部により検出された光の強度分布を吸光度スペクトルとして取得するステップと、

前記第2の測定動作時に、前記算出された照射光子数および前記取得された吸光度スペクトルに基づいて、試料により各波長で吸収された光子の数を吸収光子数として算出するステップとをさらに含む、請求項5記載の光子数算出方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、光反応評価装置および光子数算出方法に関する。

【背景技術】

【0002】

試料に励起光源により光が照射されると、他の物質または蛍光等が生成される。このような現象は光化学反応と呼ばれる。光化学反応の評価指標として、量子収率が用いられる。量子収率は、(光の照射により試料内で生成された物質の分子数)/(試料により吸収された光子数)で表される。本明細書では、励起光源を照射光源と呼ぶ。

【0003】

量子収率を算出するためには、試料により吸収された光子数を測定する必要がある。この場合、照射光源により試料に照射される光の光子数(以下、照射光子数と呼ぶ。)は、照射光源により異なるため、照射光子数を校正する必要がある。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 0 4 】

そこで、特定波長において化学反応当たり既知の吸収フォトン数を有する化学光量計を用いて照射フォトン数を校正する方法が提案されている。また、光のエネルギーを測定する光パワーメータを用いて照射フォトン数を校正する方法が提案されている。例えば、特許文献1の背景技術の欄には、化学光量計または光パワーメータを用いて照射フォトン数を校正する方法が記載されている。

【文献】特開2015-34717号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

## 【 0 0 0 5 】

しかしながら、照射フォトン数は、光の波長により変化する。したがって、照射光源の光の波長に応じた化学光量計を用いて照射フォトン数を校正する必要がある。この場合、化学光量計による吸収ピークはややブロードであるため、各波長での照射フォトン数を正確に測定することは困難である。光パワーメータでは、通常、光のエネルギーの波長分布を測定することはできないので、照射フォトン数の正確な波長分布を校正することは困難である。そのため、光化学反応に広い波長範囲の光を発生する照射光源を用いた場合には、広い波長範囲における照射フォトン数の分布を正確に校正することは難しい。

10

## 【 0 0 0 6 】

本発明の目的は、特定波長を有する光を発生する照射光源を用いた場合だけでなく広い波長範囲を有する光を発生する照射光源を用いた場合にも波長に依存する照射フォトン数の分布を正確に算出することが可能な光反応評価装置およびフォトン数算出方法を提供することである。

20

【課題を解決するための手段】

## 【 0 0 0 7 】

本発明の一面に從う光反応評価装置は、試料位置に配置された試料の光反応を評価する光反応評価装置であって、試料位置に光を照射光として照射可能に配置されるとともに、白色光を発生する標準光源に交換可能に設けられた照射光源と、試料位置に光を照射可能に配置された測定光源、および試料位置からの光の強度分布を検出するように配置された検出部を含む分光光度計と、試料が存在しない試料位置に標準光源により光が照射されかつ試料位置に測定光源により光が照射されない状態で検出部により検出された光の強度分布を第1の検出強度分布として取得し、第1の測定動作時に、試料が存在しない試料位置に照射光源により光が照射光として照射されかつ試料位置に測定光源により光が照射されない状態で検出部により検出された光の強度分布を第2の検出強度分布として取得する強度分布取得部と、強度分布取得部により取得された第1の検出強度分布、強度分布取得部により取得された第2の検出強度分布および標準光源の放射特性に基づいて、照射光源の照射光の各波長での放射強度を算出する放射強度算出部と、放射強度算出部により算出された各波長での放射強度に基づいて照射光源の照射光の各波長でのフォトン数を照射フォトン数として算出する照射フォトン数算出部とを備える。

30

## 【 0 0 0 8 】

本発明の他の局面に從うフォトン数算出方法は、試料位置に配置された試料についての光反応を評価する光反応評価装置におけるフォトン数算出方法であって、試料が存在しない試料位置に白色光を発生する標準光源により光が照射されかつ試料位置に分光光度計の測定光源により光が照射されない状態で分光光度計の検出部により検出された光の強度分布を第1の検出強度分布として取得するステップと、第1の測定動作時に、試料が存在しない試料位置に照射光源により光が照射光として照射されかつ試料位置に測定光源により光が照射されない状態で検出部により検出された光の強度分布を第2の検出強度分布として取得するステップと、取得された第1の検出強度分布、取得された第2の検出強度分布および標準光源の放射特性に基づいて、照射光源の照射光の各波長での放射強度を算出するステップと、算出された各波長での放射強度に基づいて照射光源の照射光の各波長でのフォトン数を照射フォトン数として算出するステップとを含む。

40

50

## 【発明の効果】

## 【0009】

本発明によれば、特定波長を有する光を発生する照射光源を用いた場合だけでなく広い波長範囲を有する光を発生する照射光源を用いた場合にも波長に依存する照射光子数の分布を正確に算出することが可能となる。

## 【図面の簡単な説明】

## 【0010】

【図1】図1は一実施の形態に係る光反応評価装置の構成を示すブロック図である。

【図2】図2は図1のデータ処理部の機能的な構成を示すブロック図である。

【図3】図3は図2のデータ処理部の光反応評価動作を示すフローチャートである。

10

【図4】図4は図2のデータ処理部の光反応評価動作を示すフローチャートである。

【図5】図5は標準データ取得動作を説明するための図である。

【図6】図6は標準データ取得動作により取得された第1の検出強度分布の例を示す図である。

【図7】図7は第1の測定動作を説明するための図である。

【図8】図8は第1の測定動作により取得された第2の検出強度分布の例を示す図である。

【図9】図9は照射光源の各波長での放射強度の算出方法を説明するための図である。

## 【発明を実施するための形態】

## 【0011】

以下、本発明の実施の形態に係る光反応評価装置および光子数算出方法について図面を参照しながら詳細に説明する。

20

## 【0012】

## (1) 光反応評価装置の構成

図1は一実施の形態に係る光反応評価装置の構成を示すブロック図である。図1の光反応評価装置100は、測定部10およびデータ処理部30を備える。測定部10は、照射光源1、分光光度計2および試料セル3を含む。試料セル3には、試料Sがセットされる。本実施の形態では、試料セル3の位置が試料位置に相当する。また、本実施の形態において、試料Sについての光反応の評価は、試料Sの光化学反応における吸収光子数の評価を含む。

## 【0013】

30

照射光源1は、試料セル3に励起光として光を照射する。照射光源1としては、特定の波長の光、特定の波長範囲の光、多波長の光または白色光を発生する光源を用いることができる。照射光源1は、例えば、LED（発光ダイオード）、キセノンランプ、水銀ランプ、または重水素ランプ等の種々の光源であってもよい。分光光度計2は、測定光源21、分光器（図示せず）および検出部22を含む。本実施の形態では、例えば、ポリクロメータを用いたマルチチャンネル分光光度計2を用いることができる。

## 【0014】

データ処理部30は、CPU（中央演算処理装置）31、RAM（ランダムアクセスメモリ）32、ROM（リードオンリメモリ）33、入出力I/F（インタフェース）34、および記憶装置35を含む。CPU31、RAM32、ROM33、入出力I/F34および記憶装置35はバス36に接続されている。データ処理部30のバス36には、操作部40および表示部50が接続される。操作部40は、キーボードまたはマウス等を含み、データ処理部30に各種指令およびデータの入力のためにユーザにより操作される。表示部50は、液晶ディスプレイまたは有機EL（エレクトロルミネッセンス）ディスプレイ等を含み、各種データ等を表示する。

40

## 【0015】

記憶装置35は、半導体メモリまたはメモリカード等の記憶媒体を含み、光反応評価プログラムを記憶する。RAM32は、CPU31の作業領域として用いられる。ROM33には、システムプログラムが記憶される。CPU31は、記憶装置35に記憶された光反応評価プログラムをRAM32上で実行することにより入出力I/F34を通して照射

50

光源 1 および分光光度計 2 を制御するとともに、分光光度計 2 の出力信号を入出力 I / F 3 4 を通して受ける。これにより、後述する光反応評価方法が実施される。光反応評価方法は、フォトン数算出方法を含む。

【 0 0 1 6 】

光反応評価装置 1 0 0 は、後述する標準光源 1 S ( 図 2 ) を用いた標準データ取得動作、照射光源 1 を用いた第 1 の測定動作、および試料 S の測定を行う第 2 の測定動作を実行する。

【 0 0 1 7 】

( 2 ) データ処理部 3 0 の機能的な構成

図 2 は図 1 のデータ処理部 3 0 の機能的な構成を示すブロック図である。図 2 に示すように、データ処理部 3 0 は、強度分布取得部 3 1 0、記憶部 3 2 0、放射強度算出部 3 3 0、照射フォトン数算出部 3 4 0、動作制御部 3 5 0、吸光度スペクトル取得部 3 6 0、吸収フォトン数算出部 3 7 0 および表示制御部 3 8 0 を含む。上記の構成要素 ( 3 1 0 ~ 3 8 0 ) の機能は、図 1 の CPU 3 1 が記憶装置 3 5 等の記憶媒体 ( 記録媒体 ) に記憶されたコンピュータプログラムである光反応評価プログラムを実行することにより実現される。なお、データ処理部 3 0 の一部または全ての構成要素が電子回路等のハードウェアにより実現されてもよい。

10

【 0 0 1 8 】

標準データ取得動作時には、測定部 1 0 ( 図 1 ) に、照射光源 1 に代えて図 2 に一点鎖線で示される標準光源 1 S が取り付けられる。標準光源 1 S は、照射光源 1 により発生される光の波長範囲以上の波長範囲を有する光を発生する光源である。標準光源 1 S として白色光源が用いられる。白色光源は、例えば、白色光を発生する LED であるが、他の白色光源が用いられてもよい。標準光源 1 S は、広い波長範囲の光を発生する光源である。以下、標準光源 1 S が発生する光の全波長における放射強度分布を標準光源 1 S の放射特性と呼ぶ。放射特性は、標準光源 1 S が発生する光の各波長での放射強度を含む。標準光源 1 S の放射特性は、予め正確に測定されている。分光光度計 2 は、波長に依存する波長感度分布特性を有するので、通常、標準光源 1 S が発生する光の放射強度分布と分光光度計 2 により検出される標準光源 1 S からの光の強度分布とは異なる。

20

【 0 0 1 9 】

強度分布取得部 3 1 0 は、標準データ取得動作時に、分光光度計 2 の検出部 2 2 により検出される光の強度分布を第 1 の検出強度分布として取得する。第 1 の検出強度分布は、標準光源 1 S により試料セル 3 に照射される白色光の全波長において検出された光の強度分布である。また、強度分布取得部 3 1 0 は、第 1 の測定動作時に、分光光度計 2 の検出部 2 2 により検出される光の強度分布を第 2 の検出強度分布として取得する。第 2 の検出強度分布は、照射光源 1 により試料セル 3 に照射される光の波長範囲において検出された光の強度分布である。照射光源 1 が白色光源である場合には、第 2 の検出強度分布は全波長において検出された光の強度分布である。照射光源 1 が特定の波長の光または特定の波長範囲の光を発生する光源である場合には、第 2 の検出強度分布は特定の波長または特定の波長範囲において検出された光の強度分布である。

30

【 0 0 2 0 】

記憶部 3 2 0 は、標準データ取得時に強度分布取得部 3 1 0 により取得された第 1 の検出強度分布および第 1 の測定動作時に強度分布取得部 3 1 0 により取得された第 2 の検出強度分布を記憶する。また、記憶部 3 2 0 は、標準光源 1 S の放射特性を予め記憶する。さらに、記憶部 3 2 0 は、後述する照射フォトン数算出部 3 4 0 により算出された照射フォトン数および吸収フォトン数算出部 3 7 0 により算出された吸収フォトン数を記憶する。

40

【 0 0 2 1 】

放射強度算出部 3 3 0 は、第 1 の測定動作時に、記憶部 3 2 0 に記憶された第 1 の検出強度分布、第 2 の検出強度分布、および標準光源 1 S の各波長での放射強度に基づいて、照射光源 1 の各波長での放射強度を算出する。算出方法の詳細については後述する。

【 0 0 2 2 】

50

照射フォトン数算出部 340 は、放射強度算出部 330 により算出された各波長での放射強度に基づいて、照射光源 1 により試料セル 3 に照射される光のフォトン数（以下、照射フォトン数と呼ぶ。）を算出する。算出方法の詳細については後述する。

#### 【0023】

動作制御部 350 は、ユーザによる操作部 40 の操作に基づいて標準データ取得動作、第 1 の測定動作および第 2 の測定動作を実行するために、データ処理部 30 の各構成要素の動作を制御するとともに、標準光源 1 S、照射光源 1、および分光光度計 2 の測定光源 21 の動作を制御する。

#### 【0024】

吸光度スペクトル取得部 360 は、第 2 の測定動作時に、分光光度計 2 の検出部 22 により検出される光の強度分布を吸光度スペクトルとして取得する。吸収フォトン数算出部 370 は、吸光度スペクトル取得部 360 により取得された吸光度スペクトルおよび照射フォトン数算出部 340 により算出された照射フォトン数に基づいて各波長での吸収フォトン数を算出する。算出方法の詳細については後述する。

10

#### 【0025】

表示制御部 380 は、操作部 40 の操作に基づいて、照射フォトン数算出部 340 により算出された照射フォトン数、吸収フォトン数算出部 370 により算出された吸収フォトン数および吸光度スペクトル取得部 360 により取得された吸光度スペクトルを表示部 50 に表示させる。

#### 【0026】

##### （3）光反応評価装置 100 の動作

図 3 および図 4 は図 2 のデータ処理部 30 の光反応評価動作を示すフローチャートである。図 5 は標準データ取得動作を説明するための図である。図 6 は標準データ取得動作により取得された第 1 の検出強度分布の例を示す図である。図 7 は第 1 の測定動作を説明するための図である。図 8 は第 1 の測定動作により取得された第 2 の検出強度分布の例を示す図である。図 9 は照射光源 1 の各波長での放射強度の算出方法を説明するための図である。図 6、図 8 および図 9 の縦軸は、分光光度計 2 により検出される各波長での検出強度を表し、横軸は波長を表す。

20

#### 【0027】

光反応評価装置 100 の光反応評価動作は、上記のように、標準データ取得動作、第 1 の測定動作および第 2 の測定動作を含む。図 3 および図 4 の光反応評価動作は、図 2 の CPU 31 が光反応評価プログラムを実行することにより行われる。

30

#### 【0028】

標準データ取得動作は、例えば、光反応評価装置 100 の据付け時またはメンテナンス時に行われる。ここで、標準データは、第 1 の検出強度分布および標準光源 1 S の放射特性（各波長での放射強度）を含む。第 1 の測定動作は、例えば、日常的に行われる。第 2 の測定動作は、試料 S の測定時に行われる。

#### 【0029】

標準データ取得動作時には、作業者が操作部 40 に照射光源 1 の代わりに標準光源 1 S を取り付ける。試料セル 3 には試料 S はセットされない。動作制御部 350 は、操作部 40 により標準データ取得動作が指示されたか否かを判定する（ステップ S1）。標準データ取得動作が指示された場合には、動作制御部 350 は、標準光源 1 S が試料セル 3 に光を照射するように標準光源 1 S を制御する（ステップ S2）。これにより、図 5 に示すように、標準光源 1 S により放射された光が試料セル 3 に照射され、試料セル 3 からの光が分光光度計 2 に入射する。このとき、分光光度計 2 の測定光源 21 からは試料セル 3 に光が照射されない。

40

#### 【0030】

強度分布取得部 310 は、分光光度計 2 の検出部 22 により検出された光の強度分布を第 1 の検出強度分布として取得する（ステップ S3）。図 6 には、検出強度と波長との関係が第 1 の検出強度分布 E1 として示される。強度分布取得部 310 は、取得された第

50

1の検出強度分布E1を記憶部320に記憶させる(ステップS4)。これにより、標準データ取得動作が完了する。

【0031】

第1の測定動作時には、ユーザが測定部10に照射光源1を取り付ける。試料セル3には試料Sはセットされない。動作制御部350は、操作部40により第1の測定動作が指示されたか否かを判定する(ステップS5)。第1の測定動作が指示された場合には、動作制御部350は、照射光源1が試料セル3に光を照射するように照射光源1を制御する(ステップS6)。これにより、図7に示すように、照射光源1により放射された光が試料セル3に照射され、試料セル3からの光が分光光度計2に入射する。このとき、分光光度計2の測定光源21からは試料セル3に光が照射されない。

10

【0032】

強度分布取得部310は、分光光度計2の検出部22により検出された光の強度分布を第2の検出強度分布として取得する(ステップS7)。図8には、検出強度と波長との関係が第2の検出強度分布E2として示される。強度分布取得部310は、取得された第2の検出強度分布E2を記憶部320に記憶させる(ステップS8)。

【0033】

放射強度算出部330は、記憶部320に記憶された第1の検出強度分布E1、第2の検出強度分布E2および標準光源1Sの放射特性から以下の方法で照射光源1の各波長での放射強度を算出する(ステップS9)。本例で、各波長とは、特定ピッチで分割された一定の波長区間を意味する。

20

【0034】

標準光源1Sの放射特性をFstdとし、分光光度計2の波長感度分布特性をFmonoとすると、第1の検出強度分布E1は次式で表される。

【0035】

$$E1 = Fstd \times Fmono \quad \dots (1)$$

照射光源1の放射特性をFirrとすると、第2の検出強度分布E2は次式で表される。ここで、照射光源1の放射特性Firrは、照射光源1により発生される光の放射強度分布を表す。放射特性Firrは、照射光源1の各波長での放射強度を含む。

【0036】

$$E2 = Firr \times Fmono \quad \dots (2)$$

上式(1)および(2)より次式が得られる。

30

【0037】

$$E1 / E2 = (Fstd \times Fmono) / (Firr \times Fmono) \quad \dots (3)$$

上式(3)より次式が得られる。

【0038】

$$Firr = (E2 / E1) \times Fstd \quad \dots (4)$$

第1の検出強度分布E1および標準光源1Sの放射特性Fstdは既知である。したがって、各波長での光の強度を検出することができる分光光度計2を用いて、照射光源1の第2の検出強度分布E2を得ることにより上式(4)から照射光源1の放射特性Firrを算出することができる。それにより、特定波長の光を発生する光源だけでなく、特定の波長範囲の光を発生する光源、多波長の光を発生する光源および白色光を発生する光源について各波長での放射強度を得ることができる。

40

【0039】

具体的には、放射強度算出部330は、次の方法により照射光源1の各波長での放射強度を算出することができる。

【0040】

図9に示すように、第1の検出強度分布E1および第2の検出強度分布E2が一定の波長ピッチで複数の波長区間に分割される。放射強度算出部330は、各波長区間における第1および第2の検出強度分布E1, E2下の面積を算出する。図9において、第1の検出強度分布E1の任意の波長区間における第1の検出強度分布E1下の面積をE1iとし

50

、第2の検出強度分布 $E_2$ の任意の波長区間における第2の検出強度分布 $E_2$ 下の面積を $E_{2i}$ とする。 $i$ は自然数である。この場合、第1の検出強度分布 $E_1$ の複数の波長区間の面積は、 $E_{11}$ 、 $E_{12}$ 、... $E_{1i}$ 、...となる。第2の検出強度分布 $E_2$ の複数の波長区間の面積は、 $E_{21}$ 、 $E_{22}$ 、... $E_{2i}$ 、...となる。また、任意の波長区間での標準光源 $S$ の放射強度を $F_{std i}$ とする。

【0041】

放射強度算出部330は、次式より任意の波長区間での照射光源1の放射強度 $F_{irri}$ を算出する(ステップS9)。

【0042】

$$F_{irri} = (E_{2i} / E_{1i}) \times F_{std i} \quad \dots (5)$$

波長 $\lambda_i$ における照射光子数 $N_{irri}(\lambda_i)$ は、プランク定数 $h$ 、光の速度 $c$ および放射強度 $F_{irri}$ を用いてアインシュタインのエネルギーの式より次式で定義される。本実施の形態では、波長 $\lambda_i$ は、 $i$ 番目の波長区間に相当する。

【0043】

$$N_{irri}(\lambda_i) = (F_{irri} / hc) \times \lambda_i \quad \dots (6)$$

照射光子数算出部340は、上式(5)より算出される各波長区間での放射強度 $F_{irri}$ を用いて、上式(6)より各波長 $\lambda_i$ での照射光子数 $N_{irri}(\lambda_i)$ を算出する(ステップS10)。照射光子数算出部340は、算出された各波長 $\lambda_i$ での照射光子数 $N_{irri}(\lambda_i)$ を記憶部320に記憶させる(ステップS11)。これにより、第1の測定動作が完了する。

【0044】

第2の測定動作時には、ユーザが測定部10(図1)の試料セル3に試料 $S$ をセットする。動作制御部350は、操作部40により第2の測定動作が指示されたか否かを判定する(ステップS12)。第2の測定動作が指示された場合には、動作制御部350は、分光光度計2の測定光源21が試料セル3の試料に光を測定光として照射するように測定光源21を制御する(ステップS13)。また、動作制御部350は、照射光源1が試料セル3の試料に光を励起光として照射するように照射光源1を制御する(ステップS14)。これにより、照射光源1により照射された励起光の光子が試料 $S$ により吸収され、光化学反応が起こる。この場合、吸収される光子数は波長 $\lambda_i$ に依存する。分光光度計2の検出部22は、試料 $S$ からの光の強度分布を検出する。

【0045】

吸光度スペクトル取得部360は、分光光度計2の検出部22により検出される光の強度分布を吸光度スペクトルとして取得する(ステップS15)。また、吸光度スペクトル取得部360は、取得された吸光度スペクトルを記憶部320に記憶させる(ステップS16)。測定期間中、試料 $S$ に照射光源1により照射光子数 $N_{irri}(\lambda_i)$ の励起光が照射される。この照射光子数 $N_{irri}(\lambda_i)$ に応じて光化学反応が進行する。したがって、吸光度スペクトル取得部360は、時系列データである吸光度スペクトルを取得する。ここで、時点 $t$ における吸光度スペクトルを $Abs(t, \lambda_i)$ とする。また、時点 $t$ において試料 $S$ が波長 $\lambda_i$ で吸収する光子数を吸収光子数 $N_{abs}(t, \lambda_i)$ とする。吸収光子数 $N_{abs}(t, \lambda_i)$ は、次式により表される。

【0046】

$$N_{abs}(t, \lambda_i) = \alpha \times (1 - 10^{-Abs(t, \lambda_i)}) \times N_{irri}(\lambda_i) \quad \dots (7)$$

上式(7)において、 $\alpha$ は試料セル3による照射光反射成分を補正するための係数である。吸収光子数算出部370は、照射光子数算出部340により算出された照射光子数 $N_{irri}(\lambda_i)$ および吸光度スペクトル取得部360により取得された吸光度スペクトル $Abs(t, \lambda_i)$ を用いて上式(7)より吸収光子数 $N_{abs}(t, \lambda_i)$ を算出する(ステップS17)。また、吸収光子数算出部370は、算出された吸収光子数 $N_{abs}(t, \lambda_i)$ を記憶部320に記憶させる(ステップS18)。これにより、第2の測定動作が完了する。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 4 7 】

次に、動作制御部 3 5 0 は、操作部 4 0 により動作終了が指示されたか否かを判定する（ステップ S 1 9）。動作終了が指示されない場合には、動作制御部 3 5 0 はステップ S 1 に戻る。ステップ S 1 において標準データ取得動作が指示されない場合には、動作制御部 3 5 0 はステップ S 5 に進む。ステップ S 5 において第 1 の測定動作が指示されない場合には、動作制御部 3 5 0 はステップ S 1 2 に進む。ステップ S 1 2 において第 2 の測定動作が指示されない場合には、動作制御部 3 5 0 はステップ S 1 9 に進む。ステップ S 1 9 において動作終了が指示された場合には、動作制御部 3 5 0 は光反応評価動作を終了する。

## 【 0 0 4 8 】

試料 S 内で光化学反応により生成された物質（原子または分子）の分子数および上記の第 2 の測定動作により算出された吸収フォトン数を用いて光化学反応における量子収率を算出することができる。試料 S 内で光化学反応により生成された物質の分子数は、例えば、試料 S をガスクロマトグラフまたは液体クロマトグラフを用いて分析することにより得られる。

## 【 0 0 4 9 】

## （ 4 ）実施の形態の効果

本実施の形態に係る光反応評価装置 1 0 0 においては、白色光を発生する標準光源 1 S を用いて得られた第 1 の検出強度分布 E 1 は広い波長範囲における各波長での検出強度を含み、標準光源 1 S の放射特性 F s t d は広い波長範囲における各波長での放射強度を含む。そのため、第 1 の測定動作時に、照射光源 1 の照射光の波長範囲における各波長での放射強度を正確に算出することができる。それにより、照射光源 1 の照射光の波長範囲における各波長での照射フォトン数を正確に算出することができる。

## 【 0 0 5 0 】

その結果、特定波長を有する光を発生する照射光源 1 を用いた場合だけでなく広い波長範囲を有する光を発生する照射光源 1 を用いた場合にも波長に依存する照射フォトン数の分布を正確に算出することが可能である。

## 【 0 0 5 1 】

また、第 1 の測定動作時に、照射光源 1 の照射光の波長範囲における各波長での照射フォトン数が正確に算出されているので、第 2 の測定動作時に、照射光源 1 の照射光の波長範囲における各波長での吸収フォトン数を正確に算出することができる。

## 【 0 0 5 2 】

さらに、標準データ取得時に取得された第 1 の検出強度分布 E 1 が記憶部 3 2 0 に記憶される。それにより、第 1 の測定動作時に、標準光源 1 S を用いて第 1 の検出強度分布 E 1 の検出を行う必要がない。したがって、第 1 の測定動作に要する時間および手間が削減される。

## 【 0 0 5 3 】

また、標準光源 1 S として白色光源が用いられるので、照射光源 1 として種々の波長または波長範囲の光を発生する光源を用いることができる。それにより、種々の照射光源 1 の各波長での照射フォトン数を正確に算出することができる。したがって、所望の波長の光を用いて試料 S による吸収フォトン数を正確に算出することができる。

## 【 0 0 5 4 】

## （ 5 ）他の実施の形態

上記実施の形態では、試料セル 3 の位置が試料位置に相当するが、試料位置は試料セル 3 の位置に限らず、試料 S が保持または支持される他の試料保持部または試料支持部の位置であってもよい。

## 【 0 0 5 5 】

光反応評価装置 1 0 0 のデータ処理部 3 0 は、パーソナルコンピュータにより構成されてもよく、スマートフォン等の携帯電子端末により構成されてもよく、ネットワークに接続されたサーバ等により構成されてもよい。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 5 6 】

## ( 6 ) 態様

上述した複数の例示的な実施の形態は、以下の態様の具体例であることが当業者により理解される。

## 【 0 0 5 7 】

( 第 1 項 ) 一態様に係る光反応評価装置は、試料位置に配置された試料の光反応を評価する光反応評価装置であって、

前記試料位置に光を照射光として照射可能に配置されるとともに、白色光を発生する標準光源に交換可能に設けられた照射光源と、

前記試料位置に光を照射可能に配置された測定光源、および前記試料位置からの光の強度分布を検出するように配置された検出部を含む分光光度計と、

試料が存在しない前記試料位置に前記標準光源により光が照射されかつ前記試料位置に前記測定光源により光が照射されない状態で前記検出部により検出された光の強度分布を第 1 の検出強度分布として取得し、第 1 の測定動作時に、試料が存在しない前記試料位置に前記照射光源により光が照射光として照射されかつ前記試料位置に前記測定光源により光が照射されない状態で前記検出部により検出された光の強度分布を第 2 の検出強度分布として取得する強度分布取得部と、

前記強度分布取得部により取得された第 1 の検出強度分布、前記強度分布取得部により取得された第 2 の検出強度分布および前記標準光源の放射特性に基づいて、前記照射光源の照射光の各波長での放射強度を算出する放射強度算出部と、

前記放射強度算出部により算出された各波長での放射強度に基づいて前記照射光源の照射光の各波長での光子数を照射光子数として算出する照射光子数算出部とを備えてもよい。

## 【 0 0 5 8 】

第 1 項に記載の光反応評価装置によれば、標準光源を用いて得られた第 1 の検出強度分布が取得される。標準光源の放射特性は既知である。第 1 の測定動作時には、試料位置に照射光源により光が照射された状態で検出部により検出された光の強度分布が第 2 の検出強度分布として取得される。さらに、取得された第 1 の検出強度分布、取得された第 2 の検出強度分布および標準光源の放射特性に基づいて、照射光源の照射光の各波長での放射強度が算出される。また、算出された各波長での放射強度に基づいて照射光源の照射光子数が算出される。

## 【 0 0 5 9 】

この場合、白色光を発生する標準光源を用いて得られた第 1 の検出強度分布は広い波長範囲における各波長での検出強度を含み、標準光源の放射特性は広い波長範囲における各波長での放射強度を含む。そのため、第 1 の測定動作時に、照射光源の照射光の波長範囲における各波長での放射強度を正確に算出することができる。それにより、照射光源の照射光の波長範囲における各波長での照射光子数を正確に算出することができる。

## 【 0 0 6 0 】

その結果、特定波長を有する光を発生する照射光源を用いた場合だけでなく広い波長範囲を有する光を発生する照射光源を用いた場合にも波長に依存する照射光子数の分布を正確に算出することが可能である。

## 【 0 0 6 1 】

( 第 2 項 ) 第 1 項に記載の光反応評価装置は、

第 2 の測定動作時に、前記試料位置の試料に前記測定光源により光が照射されかつ前記試料位置の試料に前記照射光源により光が照射された状態で前記検出部により検出された光の強度分布を吸光度スペクトルとして取得する吸光度スペクトル取得部と、

前記第 2 の測定動作時に、前記照射光子数算出部により算出された照射光子数および前記吸光度スペクトル取得部により取得された吸光度スペクトルに基づいて、試料により各波長で吸収された光子の数を吸収光子数として算出する吸収光子数算出部とをさらに備えてもよい。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 6 2 】

第 2 項に記載の光反応評価装置によれば、第 2 の測定動作時に、照射光源により試料位置の試料に光が照射される状態で分光光度計により検出された光の強度分布が吸光度スペクトルとして取得される。照射光子数および吸光度スペクトルに基づいて、吸収光子数が算出される。この場合、第 1 の測定動作時に、照射光源の照射光の波長範囲における各波長での照射光子数が正確に算出されている。したがって、照射光源の照射光の波長範囲における各波長での吸収光子数を正確に算出することができる。

## 【 0 0 6 3 】

(第 3 項) 第 1 項または第 2 項に記載の光反応評価装置は、

前記第 1 の測定動作時および前記第 2 の測定動作時より前に、前記強度分布取得部により取得された第 1 の検出強度分布を記憶する記憶部をさらに備えてもよく、

10

前記強度分布取得部は、前記第 1 の測定動作時に、前記記憶部に記憶された第 1 の検出強度分布を取得してもよい。

## 【 0 0 6 4 】

第 3 項に記載の光反応評価装置によれば、第 1 の測定動作時および第 2 の測定動作時より前に取得された第 1 の検出強度分布が記憶部に記憶される。それにより、第 1 の測定動作時に、標準光源を用いた第 1 の検出強度分布の検出を行う必要がない。したがって、第 1 の測定動作に要する時間および手間が削減される。

## 【 0 0 6 5 】

(第 4 項) 第 1 項～第 3 項のいずれか一項に記載の光反応評価装置において、

20

前記照射光源として、白色光、単色光または一定波長範囲の光を発生する光源が選択的に設けられてもよい。

## 【 0 0 6 6 】

第 4 項に記載の光反応評価装置によれば、照射光源として種々の波長または波長範囲の光を発生する光源を用いることができる。それにより、所望の波長の光を用いて種々の試料についての光反応を正確に評価することができる。

## 【 0 0 6 7 】

(第 5 項) 他の態様に係る光子数算出方法は、試料位置に配置された試料についての光反応を評価する光反応評価装置における光子数算出方法であって、

試料が存在しない前記試料位置に白色光を発生する標準光源により光が照射されかつ前記試料位置に分光光度計の測定光源により光が照射されない状態で前記分光光度計の検出部により検出された光の強度分布を第 1 の検出強度分布として取得するステップと、

30

第 1 の測定動作時に、試料が存在しない前記試料位置に照射光源により光が照射光として照射されかつ前記試料位置に前記測定光源により光が照射されない状態で前記検出部により検出された光の強度分布を第 2 の検出強度分布として取得するステップと、

前記取得された第 1 の検出強度分布、前記取得された第 2 の検出強度分布および前記標準光源の放射特性に基づいて、前記照射光源の照射光の各波長での放射強度を算出するステップと、

前記算出された各波長での放射強度に基づいて前記照射光源の照射光の各波長での光子数を照射光子数として算出するステップとを含んでもよい。

40

## 【 0 0 6 8 】

第 5 項に記載の光子数算出方法によれば、白色光を発生する標準光源に対応する第 1 の検出強度分布は広い波長範囲における各波長での検出強度を含み、標準光源の放射特性は広い波長範囲における各波長での放射強度を含む。そのため、第 1 の測定動作時に、照射光源の照射光の波長範囲における各波長での放射強度を正確に算出することができる。それにより、照射光源の照射光の波長範囲における各波長での照射光子数を正確に算出することができる。

## 【 0 0 6 9 】

その結果、特定波長を有する光を発生する照射光源を用いた場合だけでなく広い波長範囲を有する光を発生する照射光源を用いた場合にも波長に依存する照射光子数の分布

50

を正確に算出することが可能である。

【 0 0 7 0 】

(第6項) 第5項に記載の光子数算出方法は、

第2の測定動作時に、前記試料位置の試料に前記測定光源により光が照射されかつ前記試料位置の試料に前記照射光源により光が照射された状態で前記検出部により検出された光の強度分布を吸光度スペクトルとして取得するステップと、

前記第2の測定動作時に、前記算出された照射光子数および前記取得された吸光度スペクトルに基づいて、試料により各波長で吸収された光子の数を吸収光子数として算出するステップとをさらに含んでもよい。

【 0 0 7 1 】

第6項に記載の光子数算出方法によれば、第1の測定動作時に、各波長での照射光子数が正確に算出されている。したがって、第2の測定動作時に、照射光源の照射光の各波長での吸収光子数を正確に算出することができる。

10

20

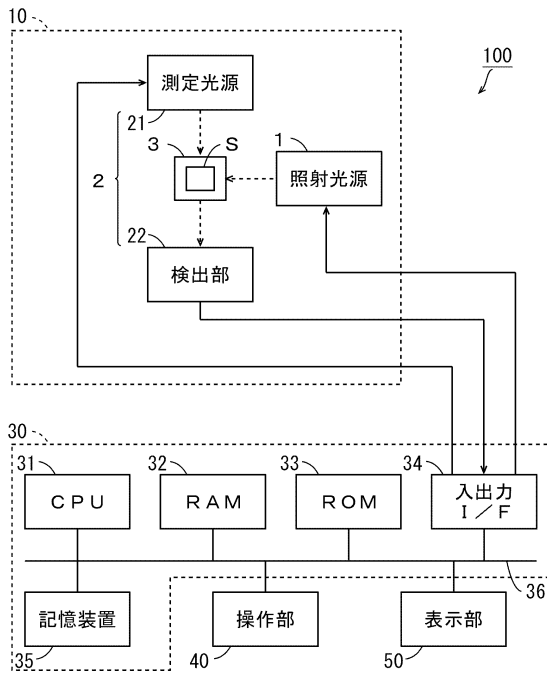
30

40

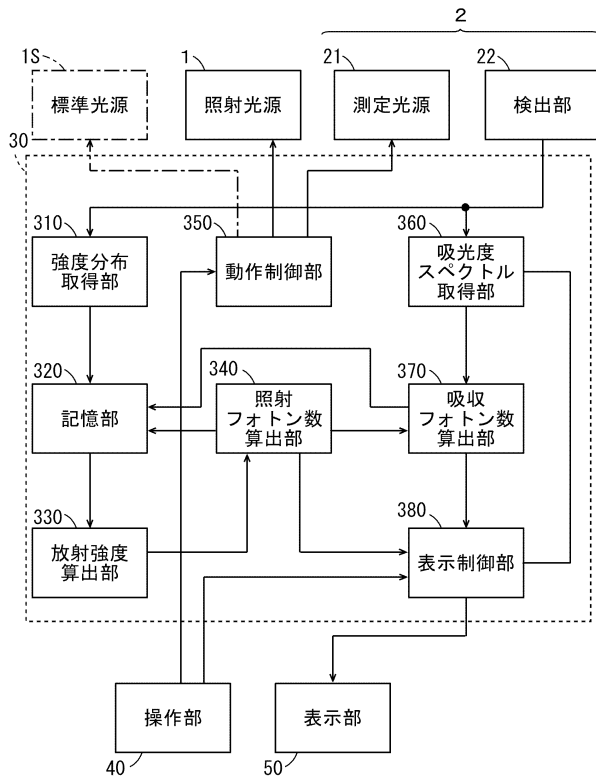
50

【図面】

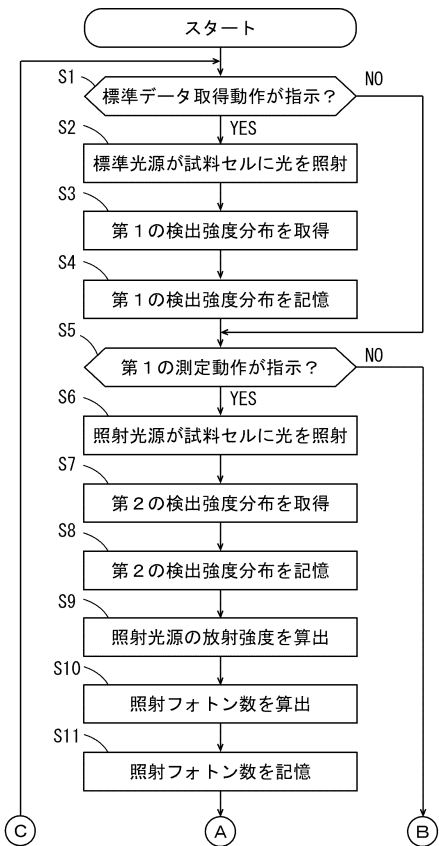
【図 1】



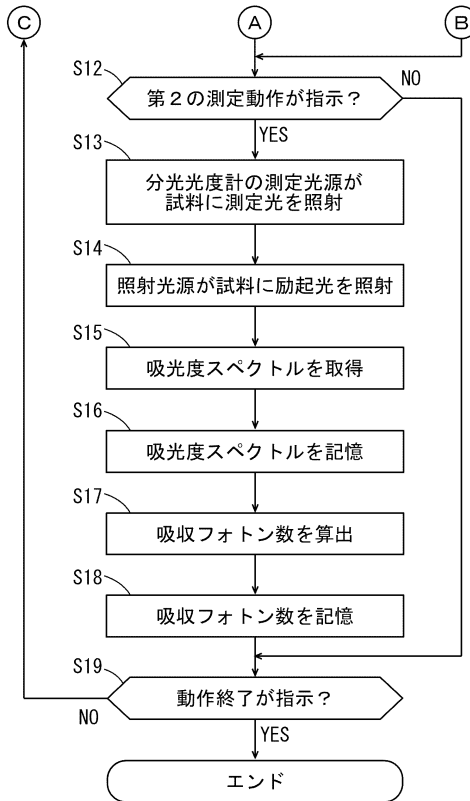
【図 2】



【図 3】



【図 4】



10

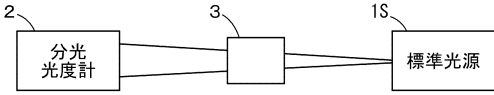
20

30

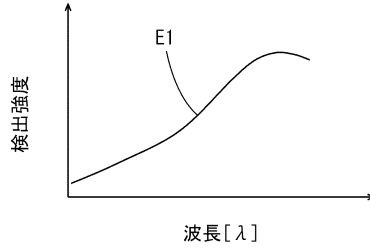
40

50

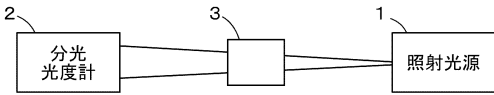
【図5】



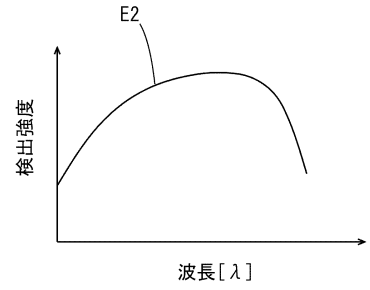
【図6】



【図7】

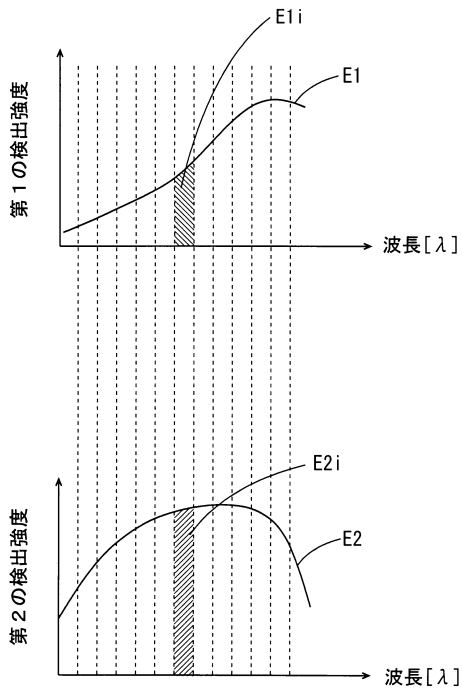


【図8】



10

【図9】



20

30

40

50

## フロントページの続き

審査官 柳澤 朱香

- (56)参考文献 特開2019-128202(JP,A)  
特開2001-060010(JP,A)  
中国特許出願公開第108033977(CN,A)  
米国特許出願公開第2010/0039952(US,A1)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)  
G01N 21/00 - G01N 21/83  
G01J 1/00 - G01J 3/52