

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第6680192号  
(P6680192)

(45) 発行日 令和2年4月15日(2020.4.15)

(24) 登録日 令和2年3月24日(2020.3.24)

(51) Int. Cl. F I  
 GO 1 N 21/27 (2006.01) GO 1 N 21/27 Z  
 GO 1 J 3/50 (2006.01) GO 1 J 3/50

請求項の数 5 (全 14 頁)

<p>(21) 出願番号 特願2016-235852 (P2016-235852)                  (22) 出願日 平成28年12月5日 (2016.12.5)                  (65) 公開番号 特開2018-91744 (P2018-91744A)                  (43) 公開日 平成30年6月14日 (2018.6.14)                  審査請求日 平成31年4月9日 (2019.4.9)</p>	<p>(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                  (74) 代理人 110001069                  特許業務法人京都国際特許事務所                  (72) 発明者 原田 知幸                  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                   審査官 中澤 真吾</p>
--	--

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 分光スペクトル解析プログラム

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

a) 試料を分光光度計で測定して得られた、縦軸が吸光度、反射率、透過率、又は蛍光強度である分光スペクトルから該分光スペクトルの形状に関する特徴量を抽出する基本解析手段と、

b) 前記分光スペクトルの形状に関する特徴量と予め与えられた演算式から前記試料の特性に関する指標値を算出する特殊解析手段と、

c) 前記基本解析手段で抽出可能な複数種類の特徴量の中から少なくとも一つ、及び前記特殊解析手段で算出可能な複数種類の指標値の中から少なくとも一つをユーザに選択させる選択手段と、

d) 前記選択手段でユーザが選択した特徴量を前記基本解析手段で抽出した結果、又は前記選択手段でユーザが選択した指標値を前記特殊解析手段で算出した結果をユーザに提示する解析結果提示手段と、

e) 前記基本解析手段によって抽出された前記特徴量の少なくとも一つ、及び前記特殊解析手段によって算出された前記指標値の少なくとも一つを、該特徴量、及び該指標値のそれぞれについて予め定められた合否判定基準と比較することにより、該特徴量及び該指標値の合否判定を行う合否判定手段と、

f) 前記合否判定手段による判定結果をユーザに提示する合否提示手段と、

g) 前記合否判定手段による複数の合否判定結果から前記試料の合否を判定する総合評価手段と、

h) 前記総合評価手段による判定結果をユーザに提示する総合評価提示手段と、  
としてコンピュータを機能させることを特徴とする分光スペクトル解析プログラム。

【請求項 2】

前記分光スペクトルの形状に関する特徴量が、前記分光スペクトルの全体又は該分光スペクトル中の予め指定された波長範囲における、吸光度、反射率、透過率、若しくは蛍光強度の最大値若しくは最小値、ピーク若しくはバレーの数、高さ若しくは深さ、幅、面積、若しくは波長、標準偏差若しくは平均値、又は予め指定された波長における吸光度、反射率、透過率、若しくは蛍光強度のうちの一つ以上であることを特徴とする請求項 1 に記載の分光スペクトル解析プログラム。

【請求項 3】

前記試料の特性に関する指標値が、色彩、色差、膜厚、日照透過率、日照反射率、バンドギャップ値、又は製剤等の溶け方を示す溶出量、溶出率、溶出時間のうちの一つ以上であることを特徴とする請求項 1 又は 2 に記載の分光スペクトル解析プログラム。

【請求項 4】

更に、

i) 前記基本解析手段によって抽出された前記特徴量及び前記特殊解析手段によって算出された前記指標値を含む単一のファイルを生成して記憶装置に記憶させる結果ファイル生成手段、

としてコンピュータを機能させることを特徴とする請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の分光スペクトル解析プログラム。

【請求項 5】

更に、

j) 試料を分光光度計で測定する際の測定条件をユーザに設定させる測定条件設定手段と、

k) 前記測定条件に基づいて分光光度計の動作を制御する測定制御手段と、

l) 前記測定条件に基づく試料測定の結果である分光スペクトルを前記分光光度計から取得するスペクトル取得手段と、

としてコンピュータを機能させると共に、

前記基本解析手段及び前記特殊解析手段が、前記スペクトル取得手段によって取得された前記分光スペクトルを用いて前記特徴量の抽出又は前記指標値の算出を行うものであることを特徴とする請求項 1 ~ 4 のいずれかに記載の分光スペクトル解析プログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、紫外可視分光光度計などの分光光度計を用いた試料（検体）の測定により得られるスペクトルを解析するためのプログラムに関する。

【背景技術】

【0002】

紫外可視分光光度計、紫外可視近赤外分光光度計、赤外分光光度計、原子吸光分光光度計、ラマン分光光度計、及び分光蛍光光度計などの分光光度計では、試料に光を照射し、該試料と相互作用した後の光（反射光、透過光、又は蛍光など）を検出することにより、横軸が波長又は波数であり、縦軸が吸光度、反射率、透過率、又は蛍光強度等であるスペクトル（以下、分光スペクトルとよぶ）が生成される。

【0003】

こうした分光光度計は、専用ソフトウェアがインストールされたパーソナルコンピュータ（PC）に接続されて用いられることが多い。ユーザは専用ソフトウェアを起動し、PCのモニタに表示されるユーザインターフェース（UI）を介して試料の分析条件及び分光スペクトルの解析条件を入力する。その後、ユーザが前記UIを介して分析開始を指示すると、前記分析条件に基づく制御信号が生成され、該制御信号がPCから分光光度計に送出される。制御信号を受けた分光光度計は、前記分析条件に従った試料分析を実行し、

10

20

30

40

50

該試料分析で得られた反射光、透過光、又は蛍光などの検出信号から分光スペクトルを生成してPCに送出する。PCは該分光スペクトルを前記解析条件に従って解析し、その結果をモニタに表示する。

#### 【0004】

前記のような分光スペクトルの解析により、例えば、該分光スペクトルの全体又は予め指定された波長範囲について、吸光度、反射率、透過率、若しくは蛍光強度（以下、「吸光度等」と総称する）の最大値や最小値、該分光スペクトル上に現れるピークの高さ、面積、若しくは波長、又は予め指定された波長における吸光度等、といった分光スペクトルの形状に関する特徴量を抽出することができる。以下、こうした分光スペクトルからの特徴量の抽出を「基本解析」とよぶ。

10

#### 【0005】

また、前記のような分光スペクトルの解析では、色彩又は色差などの色に関する値や、膜厚、日射反射率、バンドギャップ値といった、特定の種類の試料や特定の測定目的に特化した指標値を算出することも行われる。以下、このような解析を「特殊解析」とよぶ。

#### 【0006】

こうした特殊解析では、分光スペクトルに加えて、測定項目に応じた所定の情報が必要となる。例えば、色彩の測定（カラー測定）では、試料の分光スペクトル（反射率スペクトル）に加えて、光源の分光分布、及び等色関数が必要であり、これらを用いて所定の演算を行うことにより、試料の色が数値で表現される。膜厚測定では、試料である膜物質の分光スペクトル（反射率スペクトル）から抽出した特徴量である「所定の波長範囲におけるピーク（山）又はバレー（谷）の数」に加えて、前記膜物質の屈折率や、測定光の前記膜物質への入射角などの情報が必要である。また、日射透過率測定及び日射反射率測定では、前記所定の情報としてJIS 3106に定める重係数が必要であり、バンドギャップ測定では、前記所定の情報としてブランク定数及び所定の比例定数が必要である。これら所定の情報及び演算式は予め専用ソフトウェアに内蔵されているか、専用ソフトウェアが解析前にユーザに入力を求めるようになっている。

20

#### 【先行技術文献】

#### 【非特許文献】

#### 【0007】

【非特許文献1】"紫外可視近赤外(UV-Vis-NIR)分光光度計 > 付属品選択ガイド(固体試料編)", [online], 平成14年10月1日, 株式会社島津製作所, [平成28年10月12日検索], インターネット<URL:<http://www.an.shimadzu.co.jp/uv/support/faq/op/solid06.htm>>

30

#### 【発明の概要】

#### 【発明が解決しようとする課題】

#### 【0008】

しかしながら、こうした特殊解析を行うためのソフトウェアは、従来、基本解析を行うためのソフトウェアとは別のオプションソフトウェアとして提供されており、なおかつ、測定項目別に異なるオプションソフトウェアが提供されている（例えば、非特許文献1を参照）。そのため、一つの試料について基本解析と特殊解析の両方を行う場合や、一つの試料について複数の特殊解析を行う場合には、ユーザは複数のソフトウェアを使用する必要があり、操作が煩雑になるという問題があった。また、ソフトウェア毎に解析結果ファイルが生成されるため、ファイル管理が複雑になるという問題もあった。

40

#### 【0009】

ところで、製剤や各種材料等のメーカーの品質管理部門などでは、製品の品質を確認するために分光光度計等による製品（試料）の分析が行われており、得られた分光スペクトルから求められた前記特徴量や指標値に基づいて試料の合否を判定している。しかしながら、従来、こうした合否判定は、品質管理の担当者がソフトウェアによるスペクトル解析で求められた前記特徴量又は指標値と、個々の特徴量又は指標値について設けられた合否判定基準とを照らし合わせることで行っていたため、担当者の作業負担が大きいという問題があった。

50

## 【0010】

本発明は上記の点に鑑みて成されたものであり、第1の解決課題は、一つの試料について基本解析と特殊解析の両方を行う場合や、一つの試料について複数の特殊解析を行う場合におけるユーザの作業負担を軽減することであり、第2の解決課題は、基本解析又は特殊解析の結果に基づく合否判定を省力化することである。

## 【課題を解決するための手段】

## 【0011】

上記課題を解決するために成された本発明に係る分光スペクトル解析プログラムは、

a) 試料を分光光度計で測定して得られた、縦軸が吸光度、反射率、透過率、又は蛍光強度である分光スペクトルから該分光スペクトルの形状に関する特徴量を抽出する基本解析手段と、

b) 前記分光スペクトルの形状に関する特徴量と、予め与えられた演算式から前記試料の特性に関する指標値を算出する特殊解析手段と、

c) 前記基本解析手段で抽出可能な複数種類の特徴量と、前記特殊解析手段で算出可能な複数種類の指標値の中から少なくとも一つをユーザに選択させる選択手段と、

d) 前記選択手段でユーザが選択した特徴量を前記基本解析手段で抽出した結果、又は前記選択手段でユーザが選択した指標値を前記特殊解析手段で算出した結果をユーザに提示する解析結果提示手段と、

としてコンピュータを機能させることを特徴としている。

## 【0012】

本発明において、「分光スペクトルの形状に関する特徴量」とは、例えば、該分光スペクトルの全体又は予め指定された波長範囲における、吸光度等の最大値や最小値、ピーク（又はバレー）の数、高さ（深さ）、幅、面積、若しくは波長、吸光度等の平均値や標準偏差などの統計値、又は予め指定された波長における吸光度等、などの値を指す。

## 【0013】

また、本発明において「試料の特性に関する指標値」とは、前記分光スペクトルの形状に関する特徴量に基づき公知の演算（換算）により二次的に算出される、試料の特性を定量的に表した値であって、例えば、色彩、色差、膜厚、日照透過率、日照反射率、バンドギャップ値、又は製剤等の溶け方を示す溶出量、溶出率、溶出時間などの値を指す。

## 【0014】

なお、光学デバイス（UVカットガラス等）の検査では、該デバイスが所定波長域の光（例えば可視光）を透過し、なおかつ別の所定波長域の光（例えば紫外光）は遮断することを確認する場合がある。こうした場合、試料測定で得られた分光スペクトルについて、予め指定された波長範囲内で長波長側又は短波長側から順に縦軸の値（例えば透過率）を確認し、縦軸の値が予め指定された値を初めて上回る（又は下回る）時の波長値が求められる。このような場合には、該波長値が「試料の特性に関する指標値」に相当する。

## 【0015】

また、「試料の特性に関する指標値」の算出に用いる「分光スペクトルの形状に関する特徴量」としては、基本解析手段によって求められたものを利用してよく、特殊解析手段が前記分光スペクトルに基づいて独自に求めるようにしてもよい。

## 【0016】

このような構成によれば、従来別のソフトウェアで行っていた基本解析と特殊解析、又は複数種類の特殊解析を単一のソフトウェア上で行うことが可能となり、試料分析に関するユーザの作業負担を軽減することができる。

## 【0017】

なお、前記解析結果提示手段は、前記基本解析又は特殊解析の結果をLCD（Liquid Crystal Display）等から成る表示装置に出力して該表示装置の画面上に表示させるものや、前記基本解析又は特殊解析の結果をプリンタに出力して印刷させるものなどとすることができる。

## 【0018】

前記本発明に係る分光スペクトル解析プログラムは、更に、コンピュータを

e)前記基本解析手段によって抽出された前記特徴量又は前記特殊解析手段によって算出された前記指標値の少なくとも一つを該特徴量又は該指標値について予め定められた合否判定基準と比較することにより、該特徴量又は該指標値の合否判定を行う合否判定手段と

f)前記合否判定手段による判定結果をユーザに提示する合否提示手段と、  
として機能させるものとするのが望ましい。

【0019】

また、前記本発明に係る分光スペクトル解析プログラムは、  
前記合否判定手段が、前記特徴量又は前記指標値の複数について前記合否判定を行うものであって、  
更に、

g)前記合否判定手段による複数の合否判定結果から前記試料の合否を判定する総合評価手段と、

h)前記総合評価手段による判定結果をユーザに提示する総合評価提示手段と、  
としてコンピュータを機能させるものとするのがより望ましい。

【0020】

このような構成によれば、従来人手によって行っていた各特徴量や指標値の合否判定や、試料の合否判定を自動的に行うことが可能となり、合否判定に関するユーザの作業負担を一層軽減することができる。

【0021】

なお、前記判定結果提示手段又は前記総合評価提示手段も、判定結果を表示装置の画面上に表示させるものや、プリンタに印刷させるものとするができる。

【0022】

また、前記本発明に係る分光スペクトル解析プログラムは、更に、コンピュータを  
i)前記基本解析手段によって抽出された前記特徴量及び前記特殊解析手段によって算出された前記指標値を含む単一のファイルを生成して記憶装置に記憶させる結果ファイル生成手段、  
として機能させるものとするのが望ましい。

【0023】

このような構成によれば、従来は別々のファイルとして記憶されていた基本解析の結果と特殊解析の結果を単一のファイルとして記憶させることができるため、ファイル管理を簡単にすることができる。

【0024】

また、前記本発明に係る分光スペクトル解析プログラムは、更に、コンピュータを  
j)試料を分光光度計で測定する際の測定条件をユーザに設定させる測定条件設定手段と、  
k)前記測定条件に基づいて分光光度計の動作を制御する測定制御手段と、

l)前記測定条件に基づく試料測定の結果である分光スペクトルを前記分光光度計から取得するスペクトル取得手段と、  
として機能させるものであって、

前記基本解析手段及び前記特殊解析手段が、前記スペクトル取得手段によって取得された前記分光スペクトルを用いて前記特徴量の抽出又は前記指標値の算出を行うものとするのが望ましい。

【0025】

このような構成によれば、分光スペクトルの基本解析及び特殊解析に加えて、該分光スペクトルを得るための試料測定の条件設定も単一のソフトウェアで行うことが可能となるため、分析に関するオペレータの手間を更に軽減することができる。

【発明の効果】

【0026】

10

20

30

40

50

以上で説明した通り、本発明に係るプログラムによれば、一つの試料について基本解析と特殊解析の両方を行う場合や、一つの試料について複数の特殊解析を行う場合のユーザの作業負担を軽減することができる。更に、上記のような合否判定手段や総合評価手段を備えた構成によれば、基本解析又は特殊解析の結果に基づく合否判定及び総合評価を簡単に行うことができる。

【図面の簡単な説明】

【0027】

【図1】本発明の一実施例に係るプログラムを備えた分光分析システムの概略構成図。

【図2】同実施例に係るプログラムが実行する処理の一例を示すフローチャート。

【図3】同実施例における設定画面の一例を示す図。

【図4】同実施例における解析結果表示画面の一例を示す図。

【発明を実施するための形態】

【0028】

以下、本発明を実施するための形態について実施例を用いて説明する。

【実施例】

【0029】

図1は本実施例に係るプログラムを備えた分光分析システムの概略構成図である。この分光分析システムは、分光分析部100とデータ処理装置200とを含んでいる。分光分析部100は、紫外可視分光光度計と該紫外可視分光光度計に複数の試料を予め定められた順序で自動的に導入する自動試料導入装置とを含んで成る。分光分析部100とデータ処理装置200は互いに接続されており、各種のデータを授受することが可能となっている。なお、両者はいかなる形態で接続されていてもよく、例えば、LAN(Local Area Network)などを介して接続してもよいし、通信ケーブルによって直接的に接続してもよい。なお、データ処理装置200は分光分析部100の動作を制御する制御装置としての機能を併せ持っている。

【0030】

データ処理装置200の実体はパーソナルコンピュータ等の汎用のコンピュータであり、中央演算処理装置であるCPU(Central Processing Unit)201と、メモリ202と、キーボードやマウス等から成る入力部203と、LCD(Liquid Crystal Display)等から成る表示部204と、外部装置等とのLAN(Local Area Network)などのネットワークを介した接続を司るためのインターフェース(I/F)205と、HDD(Hard Disk Drive)やSSD(Solid State Drive)等の大容量記憶装置から成る記憶部210等が、互いに接続された構成を備えている。記憶部210には、オペレーティングシステム(OS)211や、分析制御/スペクトル解析プログラム212(本発明の分光スペクトル解析手段に相当)が記憶されているほか、スペクトル記憶部213、測定条件記憶部214、解析条件記憶部215、解析結果記憶部216が設けられている。

【0031】

図1に描かれているように、分析制御/スペクトル解析プログラム212には、測定条件設定部221、解析条件設定部222、測定制御部223、スペクトル取得部224、前処理部225、基本解析部226、特殊解析部227、合否判定部228、総合評価部229、結果表示制御部230、及び結果ファイル生成部231が含まれているが、これらはいずれもCPU201が分析制御/スペクトル解析プログラム212をメモリ202に読み出して実行することによってソフトウェア的に実現される機能である。なお、解析条件設定部222が、本発明における選択手段に相当し、結果表示制御部230が、本発明における、解析結果提示手段、合否提示手段、及び総合評価提示手段に相当する。

【0032】

次に、本実施例に係る分析制御/スペクトル解析プログラム212が実行する処理の一例を、図2のフローチャートを参照しつつ説明する。

【0033】

まず、分析制御/スペクトル解析プログラム212が起動している状態で、ユーザが入

10

20

30

40

50

力部 203 から所定の操作を行うと、測定条件設定部 221 が、分光分析部 100 による試料測定時の条件（測定条件）を設定するための設定画面（図示略）を表示部 204 に表示させ、ユーザに所定の事項を入力させる（ステップ S11）。このとき入力された内容、例えば、測定対象とする試料の名称、各試料の測定に適用する測定モード（吸光度測定モード、反射率測定モード、透過率測定モード、又は蛍光測定モードなど）、及び測定波長範囲などは、測定条件記憶部 214 に記憶される。

#### 【0034】

続いて、ユーザが入力部 203 から所定の操作を行うと、解析条件設定部 222 が、ステップ S11 で設定した測定条件による試料測定で得られる分光スペクトルを解析する際の条件（解析条件）を設定するための解析条件設定画面 300（図 3）を表示部 204 に表示させ、ユーザに所定の事項を入力させる（ステップ S12）。

10

#### 【0035】

解析条件設定画面 300 は、図 3 に示すように、項目選択欄 310 と、前処理設定欄 320 と、項目別設定欄 330 と、総合評価要否チェックボックス 340 とを備えている。

#### 【0036】

項目選択欄 310 には、分析制御/スペクトル解析プログラム 212 によって解析可能な複数の項目（解析項目）のリストが表示されている。ここで前記解析項目には、スペクトル上における吸光度等の最大値や最小値、スペクトル上に表れるピーク（又はバレー）の数・高さ（又は深さ）・幅・波長・面積などの基本項目に加えて、日射透過率、日射反射率、膜厚、色彩、溶出率などの特殊項目も含まれている。項目選択欄 310 では、ユーザがマウスのクリック操作などによって前記リスト中の解析項目名を選択することにより、解析対象のスペクトルに対し、いかなる解析項目についての解析を行うかを設定することができる。

20

#### 【0037】

前処理設定欄 320 は、分光分析部 100 で得られた分光スペクトルを解析する前に、該分光スペクトルから所定のブランクスペクトルを差し引いたり、ベースラインを差し引いたりといった前処理を行うか否かを設定する欄である。前処理設定欄 320 には、ブランクスペクトル差し引きチェックボックス 321、ベースライン差し引きチェックボックス 322、及び波長域設定ボタン 323 が設けられている。波長域設定ボタン 323 は、ベースライン差し引きチェックボックス 322 にチェックが入れられた場合にのみ有効となるボタンであり、該ボタン 323 を押下すると、分光スペクトルからベースラインを差し引く際の開始波長  $\lambda_a$  及び終了波長  $\lambda_b$ （後述する）をユーザに入力させるためのダイアログボックスが表示される。

30

#### 【0038】

項目別設定欄 330 は、パラメータ設定欄 331、合否判定要否チェックボックス 332、合否判定基準選択メニュー 333、閾値 1 設定ボタン 334、及び閾値 2 設定ボタン 335 を含んでいる。

#### 【0039】

パラメータ設定欄 331 は、項目選択欄 310 でユーザが選択した解析項目に応じたパラメータの設定を行う欄であり、この欄 331 に表示される内容は、項目選択欄 310 で選択された項目に応じて変化する。図 3 の例では、項目選択欄 310 において「ピーク波長」が選択されており、これに対応して、項目別設定欄 330 には、ピーク波長を求めるに当たって対象とする波長域をユーザに入力させるためのテキストボックス 331a と、ピーク検出用の判定基準をユーザに選択させるためのドロップダウンリスト 331b と、複数のピークが検出された場合に強度順で何番目のピークを採用するかをユーザに選択させるためのドロップダウンリスト 331c が表示されている。なお、項目選択欄 310 にて例えば「膜厚」が選択された場合には、パラメータ設定欄 331 には、試料である膜物質の屈折率や膜厚の算出に用いる波長範囲（計算波長範囲）をユーザに入力させるためのテキストボックスやドロップダウンリストが表示される。なお、項目選択欄 310 でいずれの解析項目も選択されていない場合には、パラメータ設定欄 331 には何も表示されな

40

50

い。

【 0 0 4 0 】

合否判定要否チェックボックス 3 3 2 は、前記各解析項目のそれぞれに関し、解析結果として得られた値の合否判定を行うか否かを設定するものであり、項目選択欄 3 1 0 でいずれかの解析項目が選択されている場合のみ有効（すなわちチェックの ON / OFF が可能な状態）となる。

【 0 0 4 1 】

合否判定基準選択メニュー 3 3 3 は、合否判定要否チェックボックス 3 3 2 が ON のときのみ有効となるメニューであり、クリック操作により「値が閾値以上であれば合格」、「値が閾値以下であれば合格」、「値が閾値の間であれば合格」、「値が閾値の間になければ合格」等を選択可能なドロップダウンリストが表示される。更に、閾値 1 設定ボタン 3 3 4 及び閾値 2 設定ボタン 3 3 5 を押下すると、ユーザに閾値を入力させるためのダイアログボックスが表示される。但し、閾値 2 設定ボタン 3 3 5 は、合否判定基準選択メニュー 3 3 3 において二つの閾値を要する判定条件が選択された場合のみ有効となる。

10

【 0 0 4 2 】

項目別設定欄 3 3 0 に設けられた OK ボタン 3 3 6 をクリックすると、項目選択欄 3 1 0 で選択されている解析項目に対応した解析条件の設定が完了する。解析対象の分光スペクトルに対し、複数種類の解析項目についての解析を行う場合は、再び項目選択欄 3 1 0 でいずれかの解析項目を選択し、項目別設定欄 3 3 0 での設定操作を行う。

【 0 0 4 3 】

総合評価要否チェックボックス 3 4 0 は、項目別設定欄 3 3 0 で設定が行われた一つ又は複数の解析項目について分光スペクトルの解析を行って得られた結果に基づいて試料の総合評価を行うか否かを設定するものである。

20

【 0 0 4 4 】

ユーザが解析条件設定画面 3 0 0 への入力を完了して該画面 3 0 0 右下の OK ボタン 3 5 0 を押下すると、同画面 3 0 0 にて設定された条件（解析条件）が解析条件記憶部 2 1 5 に記憶される。なお、複数の試料について連続分析を行う場合、試料ごとに個別に解析条件を設定するようにしてもよく、全ての試料について一括して解析条件を設定する（つまり、各試料について得られた分光スペクトルのそれぞれに対し、同一内容の解析を行うよう設定する）ようにしてもよい。

30

【 0 0 4 5 】

続いて、ユーザが入力部 2 0 3 を用いて所定の操作を行うと、測定制御部 2 2 3 による分光分析部 1 0 0 の制御が実行される（ステップ S 1 3 ）。すなわち、測定制御部 2 2 3 が測定条件記憶部 2 1 4 に記憶された測定条件に基づいて制御信号を生成して分光分析部 1 0 0 に送出する。その結果、分光分析部 1 0 0 にて前記分析条件に従った試料の測定が実行される。

【 0 0 4 6 】

分光分析部 1 0 0 では、前記測定の結果として、例えば、横軸が波長であり、縦軸が反射率である分光スペクトルが生成される。スペクトル取得部 2 2 4 は、前記測定の開始後、所定の時点（例えば一つの試料の測定が完了した時点）で分光分析部 1 0 0 から前記分光スペクトルを取得する（ステップ S 1 4 ）。

40

【 0 0 4 7 】

続いて、前処理部 2 2 5 が解析条件記憶部 2 1 5 を参照し、解析条件として前処理を行う旨が設定されているか否かを判断する（ステップ S 1 5 ）。ここで、前処理を行う旨が設定されていない場合は、直ちにステップ S 1 7 に進む。

【 0 0 4 8 】

一方、前処理を行う旨が設定されていた場合、前処理部 2 2 5 にて前記分光スペクトルの前処理が実行される（ステップ S 1 6 ）。例えば、ステップ S 1 2 においてユーザが解析条件設定画面 3 0 0 のブランクスペクトル差し引きチェックボックス 3 2 1 にチェックを入れていた場合、ステップ S 1 4 で取得された分光スペクトルから予めデータ処理装置

50

200の記憶部210に記憶されていたブランクスペクトルが差し引かれる。また、ステップS12においてユーザがベースライン差し引きチェックボックス322にチェックを入れていた場合、まず、ステップS14で取得された分光スペクトルのベースラインが決定され、その後、該ベースラインが該分光スペクトルから差し引かれる。ここで、ベースラインとは、前記分光スペクトル上における開始波長 $\lambda_a$ 及び終了波長 $\lambda_b$ におけるデータ点を結ぶ直線であり、 $\lambda_a$ 及び $\lambda_b$ はステップS12においてユーザが解析条件設定画面300上の波長域設定ボタン323をクリックし、表示されるダイアログボックスに $\lambda_a$ 及び $\lambda_b$ の値を入力することにより予め設定される。

【0049】

次に、解析条件設定画面300の解析項目選択欄310にてユーザが選択した各解析項目についての解析処理が実行される(ステップS17)。

10

【0050】

例えば、該分光スペクトルについて基本解析である「ピーク波長」の導出と特殊解析である「膜厚」の導出を行う旨が設定されていた場合、まず、基本解析部226が前記分光スペクトルに基づいてピーク面積の算出を行う。

【0051】

このとき、基本解析部226は、ステップS12において「ピーク波長」に関してパラメータ設定欄331で設定されたパラメータに基づき、前記分光スペクトル上で所定の波長範囲に存在するピークを検出し、検出されたピークのうち予め設定された条件(例えば「強度が大きい方から3番目」など)に合致するピークを特定して、その波長 $\lambda_p$ を導出する。

20

【0052】

続いて、合否判定部228が条件記憶部210に記憶されている解析条件を参照し、ステップS17で解析した項目に関して合否判定を行う旨が設定されているか否かを確認する(ステップS18)。

【0053】

このステップS18でNoとなった場合には、合否判定を行うことなく次のステップS20に進む。

【0054】

一方、ステップS18においてYesとなった場合には、合否判定部228がステップS17で求められた値(上記の例ではピーク波長)をステップS12で設定された合否判定基準(例えば「閾値1」以上であるか否か)と照らし合わせることにより、当該値の合否を判定する(ステップS19)。

30

【0055】

その後、分析制御/スペクトル解析プログラム212は、解析条件記憶部215を参照し、ユーザが設定した全ての解析項目についてスペクトル解析が完了したか否かを判断する(ステップS20)。

【0056】

このステップS20でYesとなった場合には、次のステップS21に進む。

【0057】

一方、ステップS20でNoとなった場合には、ステップS17に戻り解析が完了していない解析項目についてのスペクトル解析を実行する。

40

【0058】

上記の例では、基本解析である「ピーク波長」の導出と特殊解析である「膜厚」の導出を行う旨が設定されており、ピーク波長の導出は既に完了しているため、続いて、特殊解析部227による膜厚の導出を実行する。このとき、特殊解析部は、解析条件記憶部215から、ユーザがステップS12で膜厚に関してパラメータ設定欄331で設定したパラメータ、すなわち計算波長範囲と試料である膜物質の屈折率 $n$ を読み出し、それらの値と前記分光スペクトルに基づいて膜厚の値を算出する。

【0059】

50

具体的には、前記分光スペクトルにおいて前記計算波長範囲に現れるピークの数  $m$  を求め、以下の式から試料の膜厚  $d$  を算出する。

$$d = m / \{ 2 \cdot (n^2 - \sin^2 \theta) \}^{1/2} (1/\lambda_2 - 1/\lambda_1) \quad \dots (1)$$

ここで、 $\theta$  は試料への入射角であって分光分析部 100 を構成する紫外可視分光光度計に固有の値である。

#### 【0060】

その後、ユーザが設定した全解析項目についての解析が完了すると（すなわちステップ S20 で Yes になると）、総合評価部 229 が、解析条件記憶部 215 を参照して試料についての総合評価を行うか否かを判断する（ステップ S21）。ステップ S21 で No と判定された場合は、総合評価を行わずに次のステップ S23 に進む。

10

#### 【0061】

一方、ステップ S21 で Yes と判定された場合は、総合評価部 229 が、ステップ S19 で合否判定が行われた各解析項目についての判定結果に基づき、試料の総合評価を実行する（ステップ S22）。このときの判定基準としては、例えば全ての解析項目についての判定結果が「合格」であった場合のみ総合評価を「合格」とし、一つの解析項目でも「不合格」であった場合には総合評価を「不合格」とすることが考えられるが、これに限定されるものではない。

#### 【0062】

ステップ S22 が完了すると、分析制御/スペクトル解析プログラム 212 が、ステップ S11 で設定した全ての測定対象試料について分光スペクトルの解析が完了したか否かを判定する（ステップ S23）。ステップ S23 で No となった場合にはステップ S14 に戻り、ステップ S23 で Yes になるまでステップ S14 ~ S23 の処理を繰り返し実行する。なお、ステップ S23 で No となった時点で、分光分析部 100 での次の測定対象試料の測定が完了していなかった場合は、該測定の完了を待ってステップ S14 を実行する。

20

#### 【0063】

ステップ S23 で Yes になると、結果表示制御部 230 が、以上で得られた解析結果を表示部 204 に表示させる（ステップ S24）。

#### 【0064】

このとき表示される解析結果表示画面 400 の一例を図 4 に示す。同画面 400 では、解析結果を表形式で示した解析結果テーブル 410 が含まれている。解析結果テーブル 410 は、一行が一つの試料に対応し、各列がそれぞれ試料名、総合評価、各解析項目について導出された値、及び該値に基づく各解析項目の判定結果を示すものとなっている。図 4 の例では、Sample A~F の 6 種類の試料について、それぞれ解析項目 a ~ c の 3 種類の解析項目のそれぞれに関する値（ステップ S17 で導出された値）が表示されると共に、合否判定結果（ステップ S19 の判定結果）として合格を意味する「○」又は不合格を意味する「×」が表示されている。更に、解析項目 a ~ c の全てについて合否判定結果が合格であった試料については、総合評価として合格を意味する「○」が表示され、前記合否判定結果が一つでも不合格であった試料については、総合評価として不合格を意味する「×」が表示されている。なお、総合評価を行わなかった試料についてはその旨を示す「-」が表示されている。

30

40

#### 【0065】

次いで、分析制御/スペクトル解析プログラム 212 は、ユーザにより解析結果の保存指示がなされたか否かを判別し（ステップ S25）、該指示が成されていない場合には（ステップ S25 で No）、処理をステップ S27 に移行させる。

#### 【0066】

一方、ユーザにより解析結果の保存指示がなされた場合（ステップ S25 で Yes）、結果ファイル生成部 231 が解析結果テーブル 410 の内容を含む単一のファイルを生成して解析結果記憶部 216 に記憶させ（ステップ S26）、処理をステップ S27 に移行させる。

50

## 【 0 0 6 7 】

ステップ S 2 7 では、分析制御 / スペクトル解析プログラム 2 1 2 が、ユーザから処理終了の指示がなされたか否かを判別し、ステップ S 2 7 で Y e s になるまでステップ S 2 5 ~ S 2 6 の処理を繰り返し実行する。そして、処理終了の指示がなされた時点 ( ステップ S 2 7 で Y e s ) で一連の処理を終了する。

## 【 0 0 6 8 】

以上のように、本実施例に係る分析制御 / スペクトル解析プログラム 2 1 2 によれば、一つのプログラムを起動及び操作することにより、基本解析に該当する解析項目及び特殊解析に該当する解析項目について値を得ることができるため、ユーザの作業負担を軽減することができる。また、個々の解析項目についての合否判定や、該合否判定結果に基づく試料の総合評価を自動的に行うことができるため、こうした判定に係るユーザの負担を軽減することもできる。また更に、基本解析及び特殊解析、又は複数の特殊解析に属する解析項目についての解析結果を一つのファイルとして保存することができるため、ファイル管理を容易にすることができる。

10

## 【 0 0 6 9 】

以上、本発明を実施するための形態について実施例を挙げて説明を行ったが、本発明は上記実施例に限定されるものではなく、本発明の趣旨の範囲で適宜変更が可能である。例えば、上記の例では一つの測定対象試料について分光分析部 1 0 0 での測定が完了した時点で測定結果である分光スペクトルを取得して解析を行うものとしたが、これに限らず全ての測定対象試料の測定が完了した時点で各試料の分析で得られた分光スペクトルのそれぞれを解析するものとしてもよく、予め定められた数の試料について分光分析部 1 0 0 での分光スペクトルが生成される毎に、本発明に係るプログラムでの解析を行うものとしてもよい。

20

## 【 0 0 7 0 】

また、上記実施例では、本発明に係るプログラムを、分光分析部 1 0 0 の制御と分光スペクトルの解析の両方を行うものとしたが、これに限らず、分光分析部 1 0 0 の制御は、別個に用意された分析制御専用のプログラムによって行うものとしてもよい。

この場合、分光分析部 1 0 0 で生成された分光スペクトルは一旦データ処理装置 2 0 0 の記憶部 2 1 0 に記憶し、該分光スペクトルを本発明に係るプログラムが記憶部 2 1 0 から読み出して上記ステップ S 1 5 ~ S 2 7 の処理を行うものとすることができる。

30

## 【 0 0 7 1 】

また、本発明に係るプログラムは、紫外可視分光光度計以外の分光光度計、例えば、紫外可視近赤外分光光度計、赤外分光光度計、原子吸光分光光度計、ラマン分光光度計、及び分光蛍光光度計などで得られた分光スペクトルの解析にも適用することができる。

## 【 符号の説明 】

## 【 0 0 7 2 】

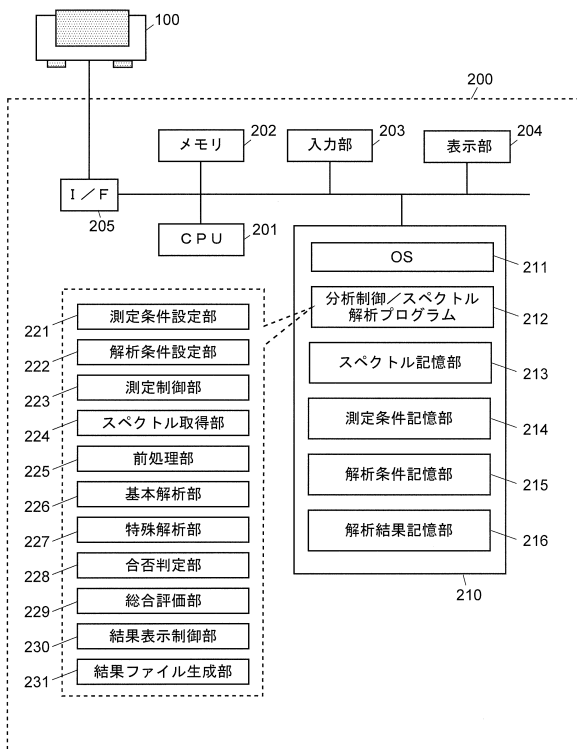
- 1 0 0 ... 分光分析部
- 2 0 0 ... データ処理装置
- 2 0 1 ... C P U
- 2 0 2 ... メモリ
- 2 0 3 ... 入力部
- 2 0 4 ... 表示部
- 2 1 0 ... 記憶部
- 2 1 0 ... 条件記憶部
- 2 1 2 ... 分析制御 / スペクトル解析プログラム
- 2 1 3 ... スペクトル記憶部
- 2 1 4 ... 測定条件記憶部
- 2 1 5 ... 解析条件記憶部
- 2 1 6 ... 解析結果記憶部
- 2 2 1 ... 測定条件設定部

40

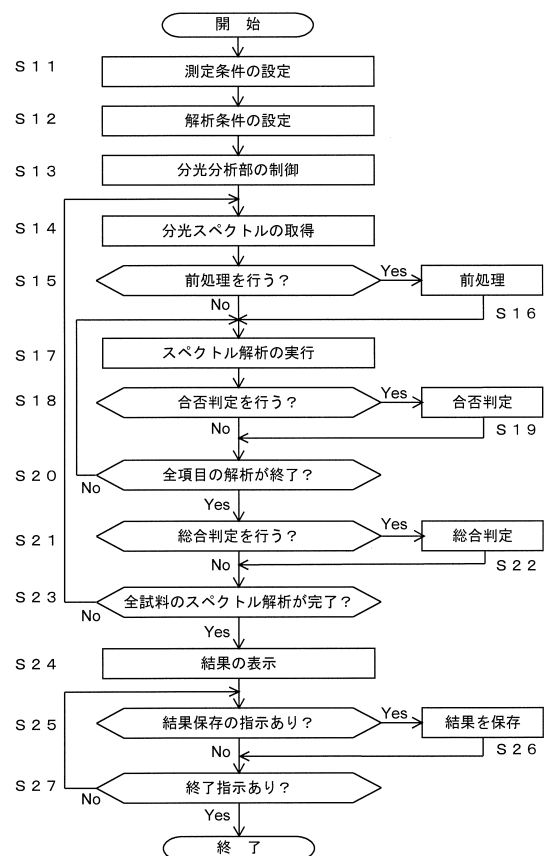
50

- 2 2 2 ... 解析条件設定部
- 2 2 3 ... 測定制御部
- 2 2 4 ... スペクトル取得部
- 2 2 5 ... 前処理部
- 2 2 6 ... 基本解析部
- 2 2 7 ... 特殊解析部
- 2 2 8 ... 合否判定部
- 2 2 9 ... 総合評価部
- 2 3 0 ... 結果表示制御部
- 2 3 1 ... 結果ファイル生成部

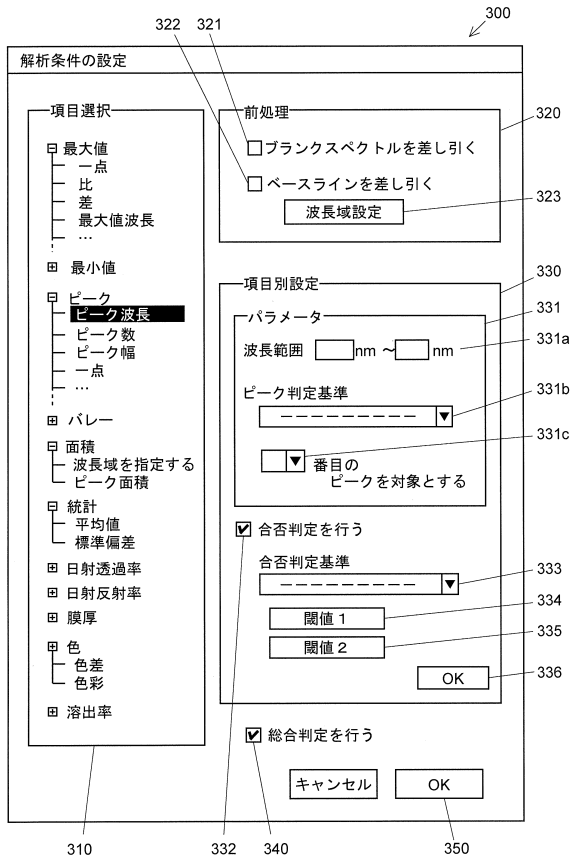
【図1】



【図2】



【図3】



【図4】

解析結果

No.	試料名	総合評価	解析項目 a		解析項目 b		解析項目 c	
			値	合否	値	合否	値	合否
1	Sample A	○	1.00	○	123.5	○	3	○
2	Sample B	×	0.50	×	124.5	○	5	×
3	Sample C	○	1.22	○	143.8	○	3	○
4	Sample D	—	1.33	○	157.9	○	3	○
5	Sample E	○	1.44	○	183.4	○	3	○
6	Sample F	×	1.55	○	223.4	×	3	○

OK

---

フロントページの続き

- (56)参考文献 特開平11-160231(JP,A)  
特開昭63-086029(JP,A)  
特開2002-073280(JP,A)  
特開2016-090919(JP,A)  
特開2003-201409(JP,A)  
特開平09-325070(JP,A)  
特開平11-051617(JP,A)  
米国特許出願公開第2004/0064299(US,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

- G01N 21/00 - 21/01  
21/17 - 21/61  
G01J 3/00 - 4/04  
7/00 - 9/04