

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関  
国際事務局

(43) 国際公開日  
2021年8月26日(26.08.2021)

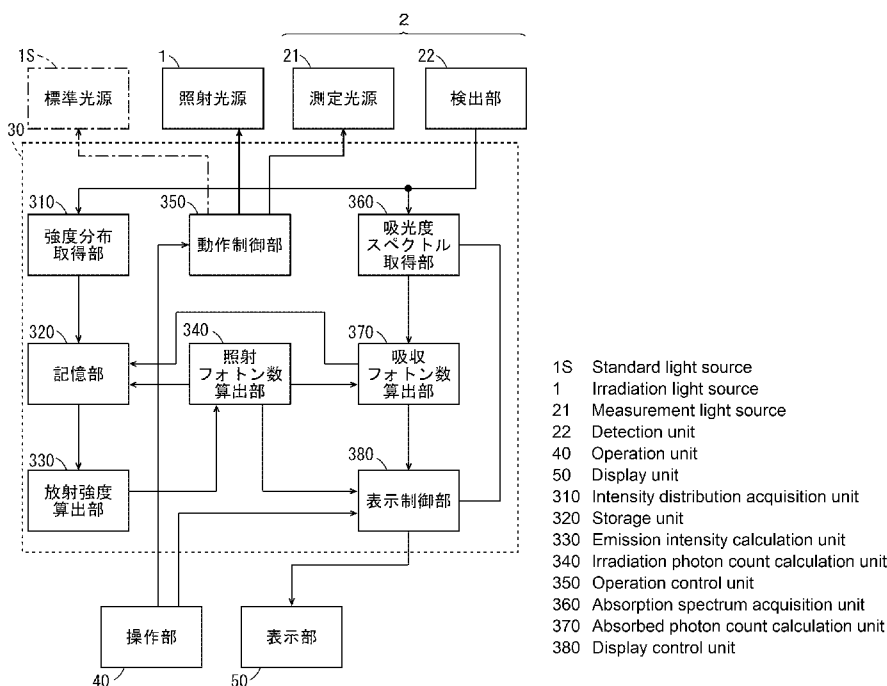


(10) 国際公開番号  
**WO 2021/166310 A1**

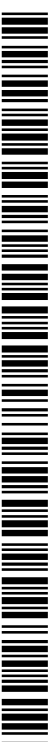
- (51) 国際特許分類:  
G01N 21/27 (2006.01) G01N 21/64 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2020/036556
- (22) 国際出願日: 2020年9月28日(28.09.2020)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:  
特願 2020-027514 2020年2月20日(20.02.2020) JP
- (71) 出願人: 株式会社島津製作所 (SHIMADZU CORPORATION) [JP/JP]; 〒6048511 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 Kyoto (JP).
- (72) 発明者: 渡邊 康之 (WATANABE, Yasuyuki); 〒6048511 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 Kyoto (JP).  
玉木 隆宏 (TAMAKI, Takahiro); 〒6048511 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 Kyoto (JP).
- (74) 代理人: 中川 雅博, 外 (NAKAGAWA, Masahiro et al.); 〒5640052 大阪府吹田市広芝町4番1号江坂・ミタカビル3階 Osaka (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN,

(54) Title: PHOTOREACTION EVALUATION DEVICE AND PHOTON COUNT CALCULATION METHOD

(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) Abstract: In the present invention, an intensity distribution acquisition unit acquires a first detected intensity distribution detected by a detection unit when a sample position is irradiated with light by a standard light source with no sample present, and, during a first measurement operation, acquires a second detected intensity distribution detected by the detection unit when the sample position is irradiated with light by an irradiation light source with no sample present. An emission intensity calculation unit calculates the emission intensity of irradiation light emitted by the irradiation light



WO 2021/166310 A1

HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類 :

- 一 国際調査報告 (条約第21条(3))

---

source at various wavelengths on the basis of the first detected intensity distribution, the second detected intensity distribution, and emission properties of the standard light source. On the basis of the emission intensity at various wavelengths, an irradiation photon count calculation unit calculates the number of irradiation photons at various wavelengths of the irradiation light emitted by the irradiation light source.

(57) 要約 : 強度分布取得部は、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た状態で検出部により検出された第1の検出強度分布を取得し、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された状態で検出部により検出された第2の検出強度分布を取得する。放射強度算出部は、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。照射フォトン数算出部は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照射フォトン数を算出する。

## 明 細 書

発明の名称：光反応評価装置およびフォトン数算出方法

### 技術分野

[0001] 本発明は、光反応評価装置およびフォトン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フォトン数）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フォトン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フォトン数（以下、照射フォトン数と呼ぶ。）は、照射光源により異なるため、照射フォトン数を校正する必要がある。

[0004] 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。

特許文献1：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

[0005] 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。

[0006] 本発明は、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。

### 課題を解決するための手段

[0007] 本発明の一局面に従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。

[0008] 本発明の他の局面に従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。

### 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フォトン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。

[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。

[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] 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（エレクトロルミネセンス）ディスプレイ等を含み、各種データ等を表示する。

[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/F34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。

[0016] 光反応評価装置100は、後述する標準光源1S（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。

[0017] （2）データ処理部30の機能的な構成

図2は図1のデータ処理部30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30は、強度分布取得部310、記憶部320、放射強度算出部330、照射フォトン数算出部340、動作制御部350、吸光度スペクトル取得部360、吸収フォトン数算出部370および表示制御部380を含む。上記の構成要素（310～380）の機能は、図1のCPU31が記憶装置35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30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。

[0018] 標準データ取得動作時には、測定部10（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1Sが取り付けられる。標準光源1S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1S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1S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1S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1Sの放射特性と呼ぶ。放射特性は、標準光源1Sが発生する光の各波長での放射強度を含む。標準光源1S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1S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1Sからの光の強度分布とは異なる。

[0019] 強度分布取得部310は、標準データ取得動作時に、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1S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310は、第1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。

[0020] 記憶部320は、標準データ取得時に強度分布取得部310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310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320は、標準光源1Sの放射特性を予め記憶する。さらに、記憶部320は、後述する照射光子数算出部340により算出された照射光子数および吸収光子数算出部370により算出された吸収光子数を記憶する。

[0021] 放射強度算出部330は、第1の測定動作時に、記憶部320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1S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。

[0022] 照射光子数算出部 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 に照射される光の光子数（以下、照射光子数と呼ぶ。）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。吸収光子数算出部 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光子数算出部 340 により算出された照射光子数に基づいて各波長での吸収光子数を算出する。算出方法の詳細については後述する。

[0025] 表示制御部 380 は、操作部 40 の操作に基づいて、照射光子数算出部 340 により算出された照射光子数、吸収光子数算出部 370 により算出された吸収光子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 $\lambda$ を表す。

[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CPU31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。

[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1S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1S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1Sが試料セル3に光を照射するように標準光源1S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1S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。

[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 $\lambda$ 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。

[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 $\lambda$ 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。

[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。

$$[0035] \quad E1 = Fstd \times Fmono \quad \dots (1)$$

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。

$$[0036] \quad E2 = Firr \times Fmono \quad \dots (2)$$

上式(1)および(2)より次式が得られる。

$$[0037] \quad E1 / E2 = (Fstd \times Fmono) / (Firr \times Fmono) \quad \dots (3)$$

上式(3)より次式が得られる。

$$[0038] \quad Firr = (E2 / E1) \times Fstd \quad \dots (4)$$

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  $E_2$  を得ることにより上式 (4) から照射光源 1 の放射特性  $F_{irr}$  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。

[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  $E_1$  および第 2 の検出強度分布  $E_2$  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  $E_1$ ,  $E_2$  下の面積を算出する。図 9 において、第 1 の検出強度分布  $E_1$  の任意の波長区間における第 1 の検出強度分布  $E_1$  下の面積を  $E_{1i}$  とし、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 1S の放射強度を  $F_{stdi}$  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)。

$$[0042] \quad F_{irri} = (E_{2i} / E_{1i}) \times F_{stdi} \quad \dots (5)$$

波長  $\lambda$  における照射光子数  $N_{irr}(\lambda)$  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  $\lambda$  は、  $i$  番目の波長区間に相当する。

$$[0043] \quad N_{irr}(\lambda) = (\lambda / hc) \times F_{irri} \quad \dots (6)$$

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  $\lambda$  での照射光子

数  $N_{i r r}(\lambda)$  を算出する（ステップ S 1 0）。照射光子数算出部 3 4 0 は、算出された各波長  $\lambda$  での照射光子数  $N_{i r r}(\lambda)$  を記憶部 3 2 0 に記憶させる（ステップ S 1 1）。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 1 0（図 1）の試料セル 3 に試料 S をセットする。動作制御部 3 5 0 は、操作部 4 0 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 S 1 2）。第 2 の測定動作が指示された場合には、動作制御部 3 5 0 は、分光光度計 2 の測定光源 2 1 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 2 1 を制御する（ステップ S 1 3）。また、動作制御部 3 5 0 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 S 1 4）。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  $\lambda$  に依存する。分光光度計 2 の検出部 2 2 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 3 6 0 は、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吸光度スペクトルとして取得する（ステップ S 1 5）。また、吸光度スペクトル取得部 3 6 0 は、取得された吸光度スペクトルを記憶部 3 2 0 に記憶させる（ステップ S 1 6）。測定期間中、試料 S に照射光源 1 により照射光子数  $N_{i r r}(\lambda)$  の励起光が照射される。この照射光子数  $N_{i r r}(\lambda)$  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 3 6 0 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  $A b s(t, \lambda)$  とする。また、時点  $t$  において試料 S が波長  $\lambda$  で吸収する光子数を吸収光子数  $N_{a b s}(t, \lambda)$  とする。吸収光子数  $N_{a b s}(t, \lambda)$  は、次式により表される。

$$[0046] \quad N_{a b s}(t, \lambda) = \alpha \times (1 - 10^{-A b s(t, \lambda)}) \times N_{i r r}(\lambda) \quad \dots (7)$$

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。吸収フォトン数算出部370は、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 $N_{irr}(\lambda)$ 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 $Abs(t, \lambda)$ を用いて上式(7)より吸収フォトン数 $N_{abs}(t, \lambda)$ を算出する(ステップS17)。また、吸収フォトン数算出部370は、算出された吸収フォトン数 $N_{abs}(t, \lambda)$ 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。

[0047] 次に、動作制御部350は、操作部40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S19)。動作終了が指示されない場合には、動作制御部350はステップS1に戻る。ステップS1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350はステップS5に進む。ステップS5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350はステップS12に進む。ステップS12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350はステップS19に進む。ステップS19において動作終了が指示された場合には、動作制御部350は光反応評価動作を終了する。

[0048] 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。

[0049] (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100においては、白色光を発生する標準光源1S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1Sの放射特性 $F_{std}$ 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。

[0050] 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。

[0051] 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。

[0052] 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 320 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。

[0053] 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。

[0054] (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。

[0055] 光反応評価装置 100 のデータ処理部 30 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。

[0056] (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。

[0057] (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てもよい。

[0058] 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

フォトン数が算出される。

[0059] 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フォトン数を正確に算出することができる。

[0060] 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フォトン数の分布を正確に算出することが可能である。

[0061] (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、前記照射フォトン数算出部により算出された照射フォトン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フォトン数を吸収フォトン数として算出する吸収フォトン数算出部とをさらに備えてもよい。

[0062] 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。照射フォトン数および吸光度スペクトルに基づいて、吸収フォトン数が算出される。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フォトン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フォトン数を正確に算出することができる。

[0063] (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、

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。

[0064] 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。

[0065] (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、

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。

[0066] 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。

[0067] (第5項) 他の態様に係る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んでもよい。

[0068] 第5項に記載のフォトン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フォトン数を正確に算出することができる。

[0069] 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フォトン数の分布を正確に算出することが可能である。

[0070] (第6項) 第5項に記載のフォトン数算出方法は、

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生成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フォトン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フォトンの数を吸収フォトン数として算出するステップとをさらに含んでもよい。

[0071] 第6項に記載のフォトン数算出方法によれば、第1の測定動作時に、各波長での照射フォトン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フォトン数を正確に算出することができる。

## 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つて、

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フォトン数を吸収フォトン数として算出する吸収フォトン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1または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1～3のいずれか一項に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フォトン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、

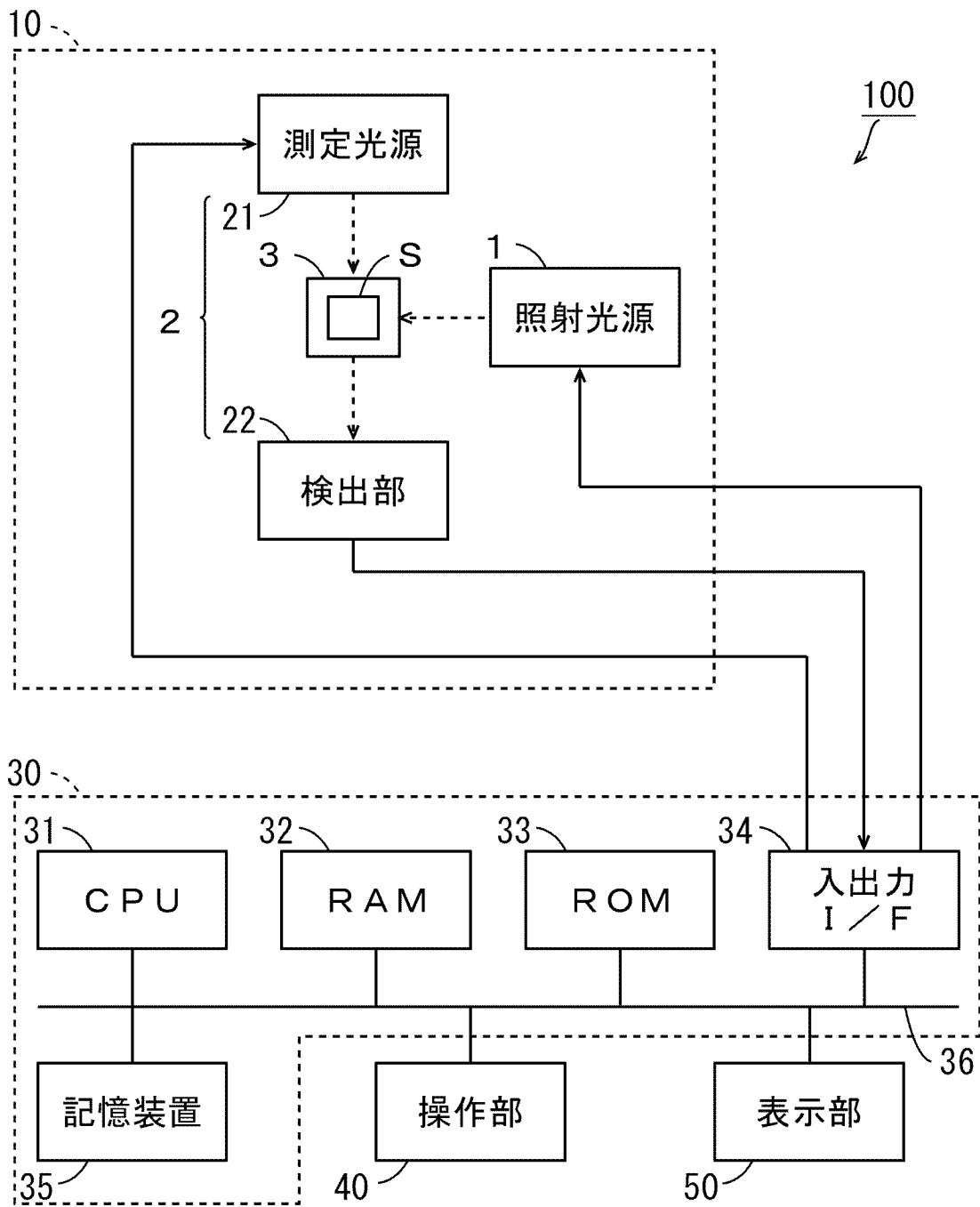
前記取得された第1の検出強度分布、前記取得された第2の検出強度分布および前記標準光源の放射特性に基づいて、前記照射光源の照射光の各波長での放射強度を算出するステップと、

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、フォトン数算出方法。

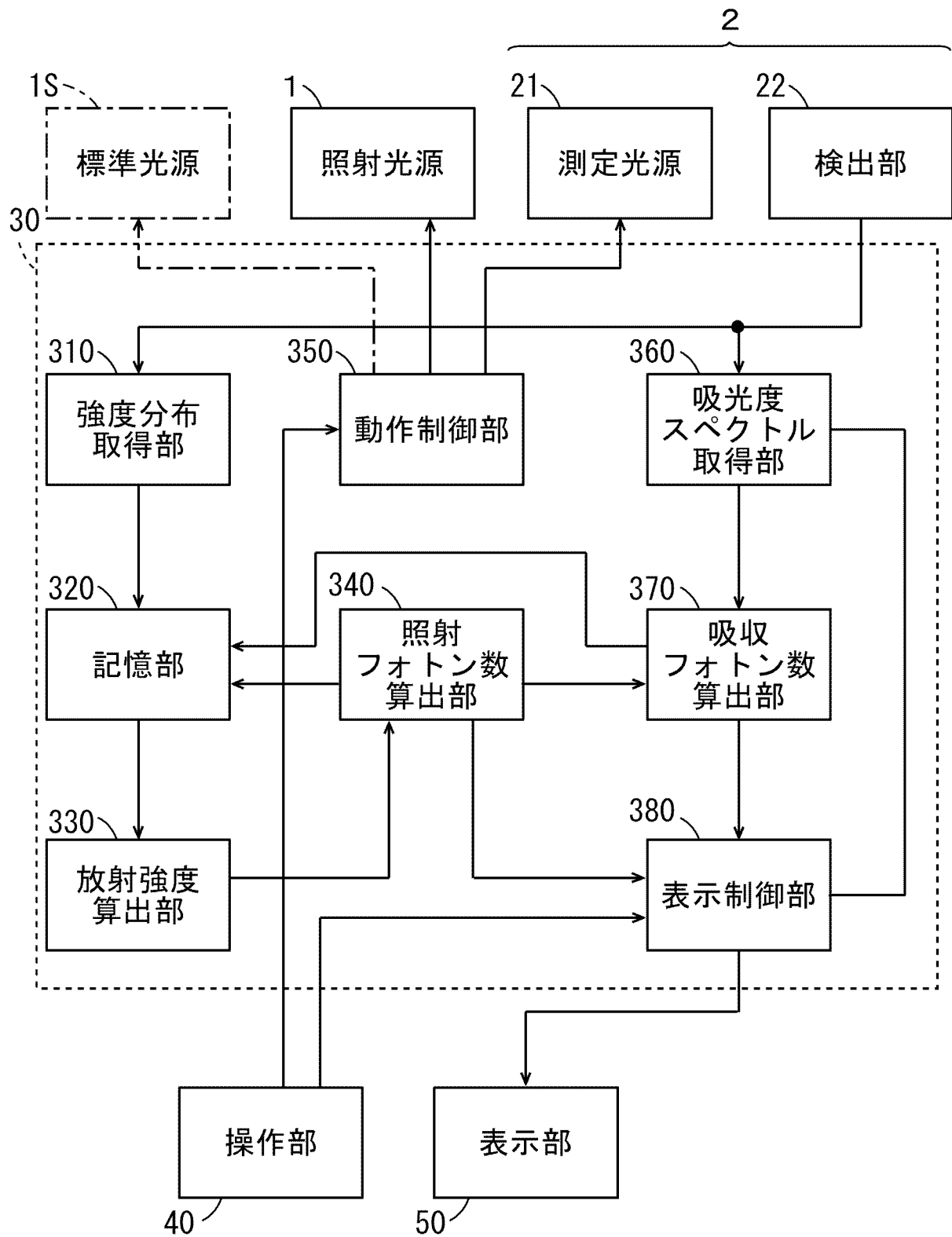
[請求項6] 第2の測定動作時に、前記試料位置の試料に前記測定光源により光が照射されかつ前記試料位置の試料に前記照射光源により光が照射された状態で前記検出部により生成された光の強度分布を吸光度スペクトルとして取得するステップと、

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。

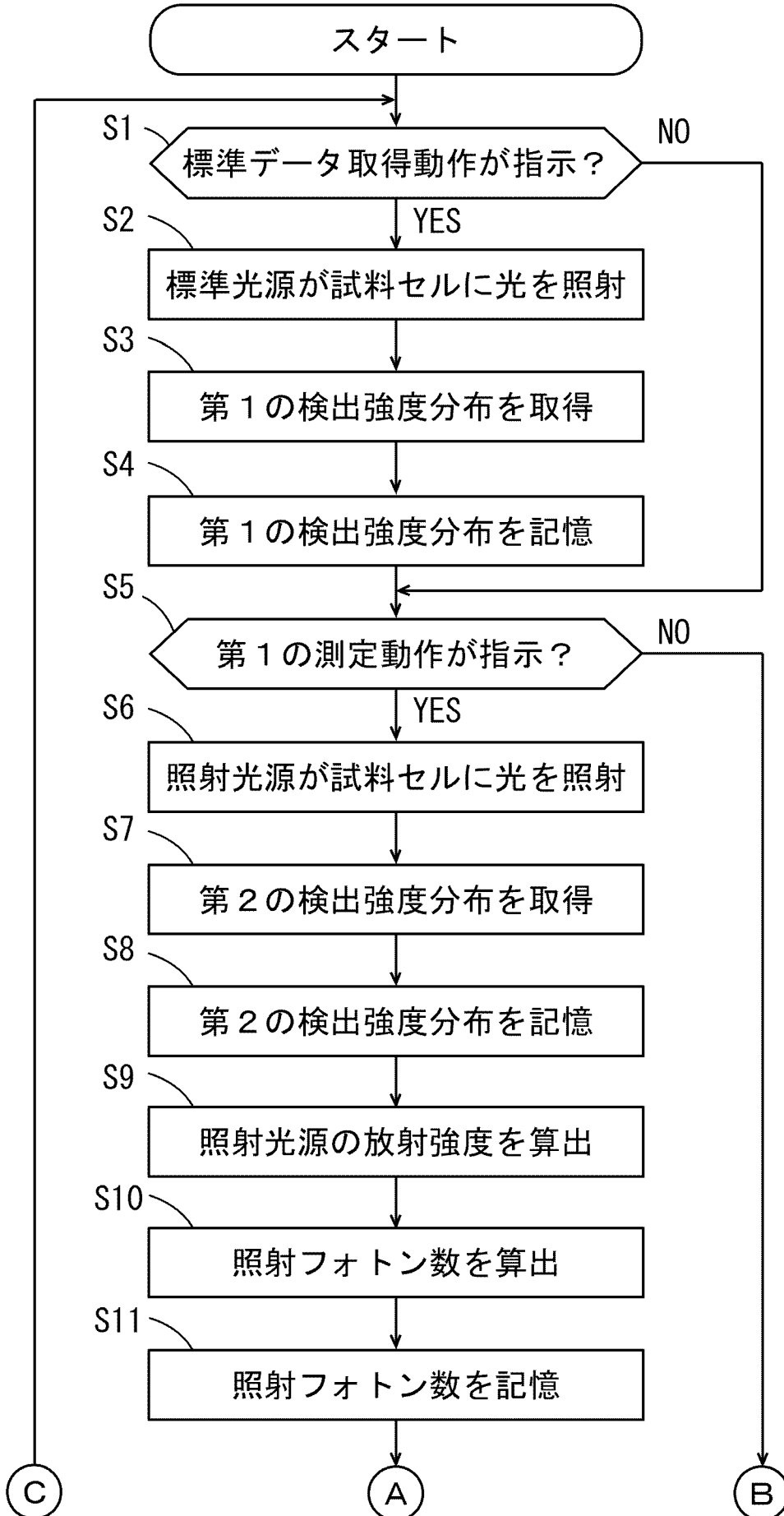
[図1]



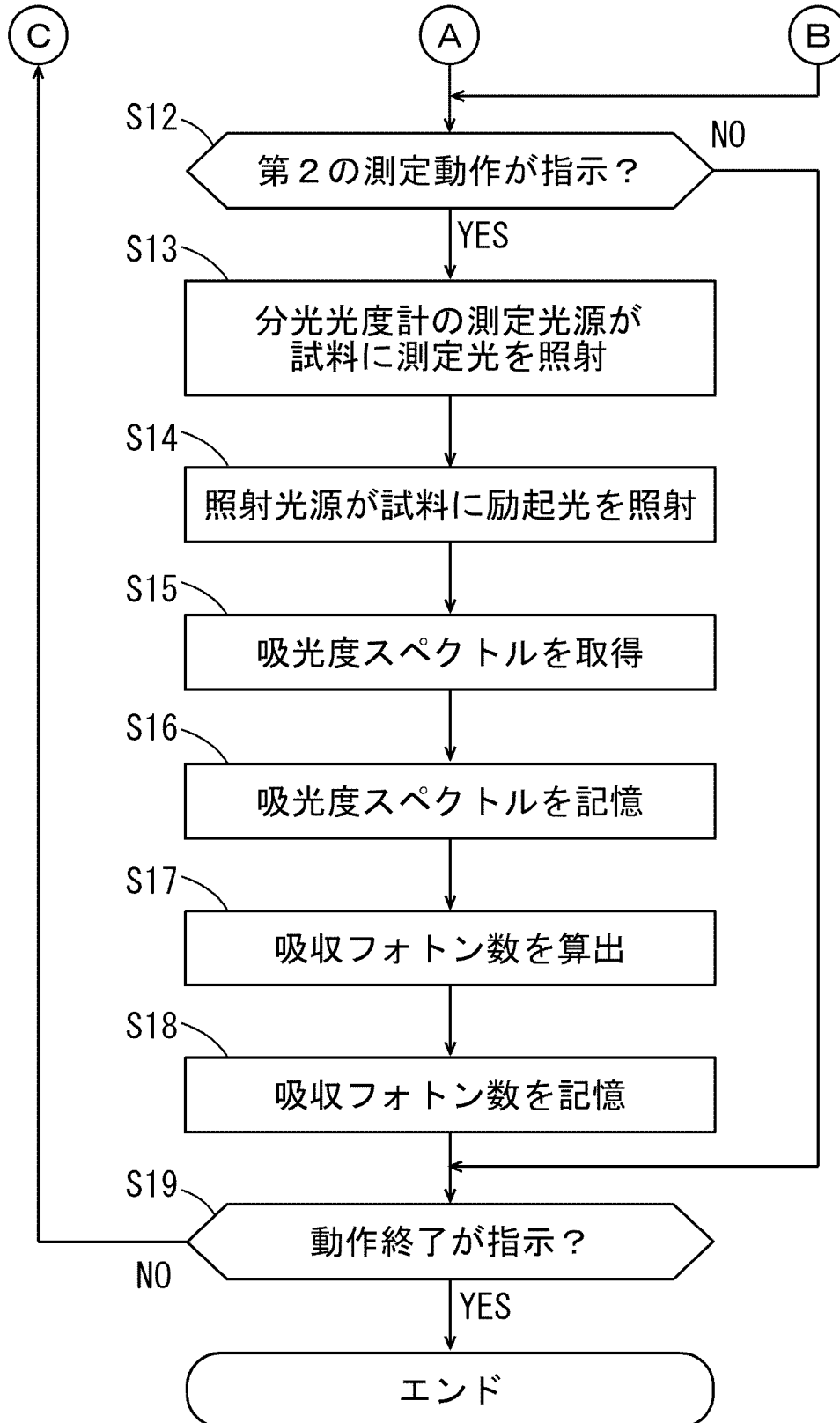
[図2]



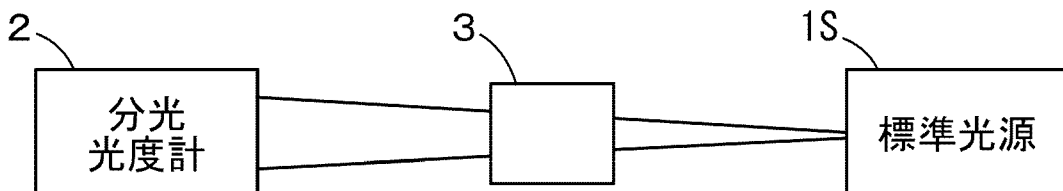
[図3]



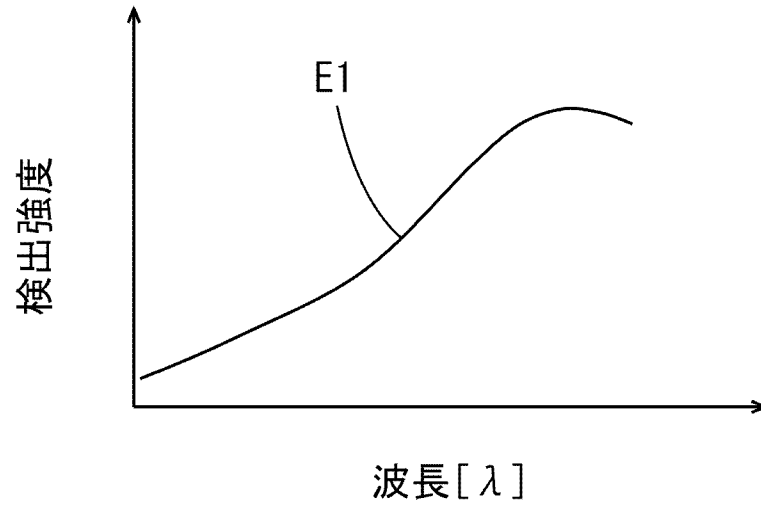
[図4]



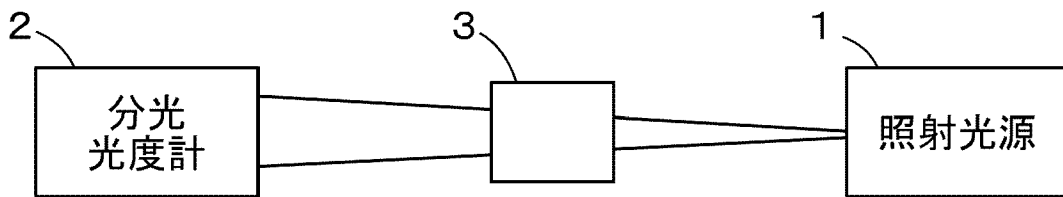
[図5]



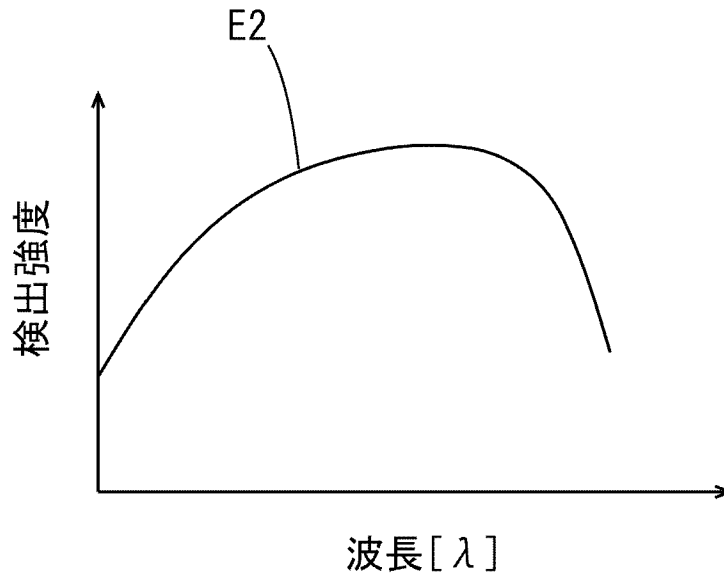
[図6]



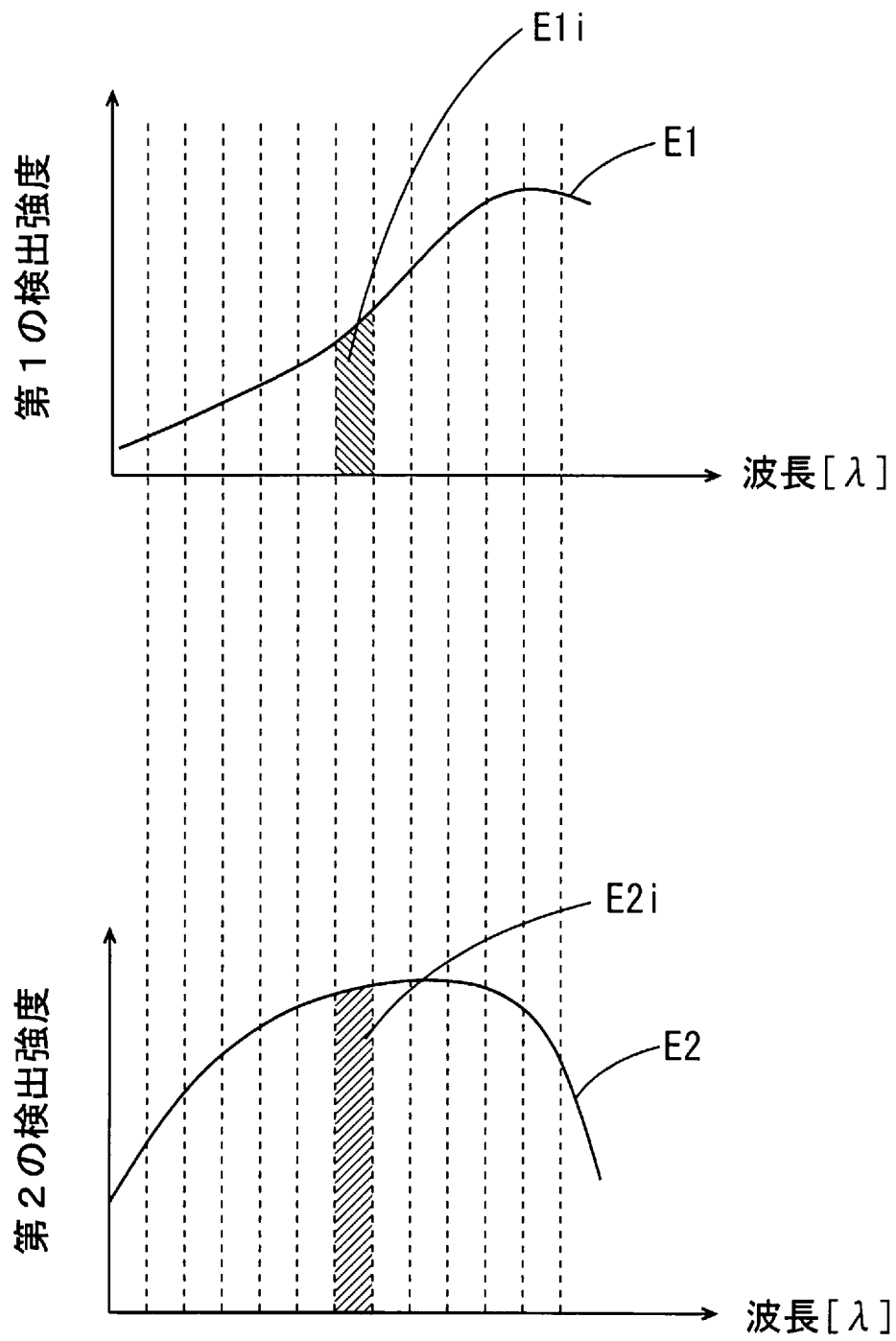
[図7]



[図8]



[図9]



**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

International application No.

PCT/JP2020/036556

**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**

Int. Cl. G01N21/2 (2006.01) i, G01N21/64 (2006.01) i  
 FI: G01N21/64 Z, G01N21/27 Z

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

**B. FIELDS SEARCHED**

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int. Cl. G01N21/00-21/83, G01J1/00-3/52

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996  
 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2020  
 Registered utility model specifications of Japan 1996-2020  
 Published registered utility model applications of Japan 1994-2020

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

**C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT**

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2019-128202 A (HAMAMATSU PHOTONICS KABUSHIKI KAISHA) 01 August 2019, entire text, all drawings	1-6
A	JP 2001-60010 A (FUJI XEROX CO., LTD.) 06 March 2001, entire text, all drawings	1-6
A	CN 108033977 A (SHANGHAI UNIVERSITY OF TECHNOLOGY) 15 May 2018, entire text, all drawings	1-6
A	US 2010/0029952 A1 (KENT STATE UNIVERSITY) 04 February 2010, entire text, all drawings	1-6

Further documents are listed in the continuation of Box C.

See patent family annex.

\* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search  
16.10.2020

Date of mailing of the international search report  
02.11.2020

Name and mailing address of the ISA/  
 Japan Patent Office  
 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,  
 Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer  
  
 Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
Information on patent family members

International application No.  
PCT/JP2020/036556

Patent Documents referred to in the Report	Publication Date	Patent Family	Publication Date
JP 2019-128202 A	01.08.2019	WO 2019/146173 A2 entire text, all drawings	
		TW 201932824 A entire text, all drawings	
JP 2001-60010 A	06.03.2001	(Family: none)	
CN 108033977 A	15.05.2018	(Family: none)	
US 2010/0029952 A1	04.02.2010	US 2012/0190098 A1 entire text, all drawings	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G01N 21/27(2006.01)i; G01N 21/64(2006.01)i FI: G01N21/64 Z; G01N21/27 Z		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G01N21/00-21/83; G01J1/00-3/52 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2020年 日本国実用新案登録公報 1996-2020年 日本国登録実用新案公報 1994-2020年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2019-128202 A (浜松ホトニクス株式会社) 01.08.2019 (2019-08-01) 全文、全図	1-6
A	JP 2001-60010 A (富士ゼロックス株式会社) 06.03.2001 (2001-03-06) 全文、全図	1-6
A	CN 108033977 A (SHANGHAI TECH UNIVERSITY) 15.05.2018 (2018-05-15) 全文、全図	1-6
A	US 2010/0029952 A1 (KENT STATE UNIVERSITY) 04.02.2010 (2010-02-04) 全文、全図	1-6
<input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献	
国際調査を完了した日 16.10.2020	国際調査報告の発送日 02.11.2020	
名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 田中 洋介 2W 1945 電話番号 03-3581-1101 内線 3256	

国際調査報告  
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2020/036556

引用文献			公表日	パテントファミリー文献			公表日
JP	2019-128202	A	01.08.2019	WO	2019/146173	A2	
				全文、全図			
				TW	201932824	A	
				全文、全図			
JP	2001-60010	A	06.03.2001	(ファミリーなし)			
CN	108033977	A	15.05.2018	(ファミリーなし)			
US	2010/0029952	A1	04.02.2010	US	2012/0190098	A1	
				全文、全図			