C103-0367

SHIMADZU
Excellence in Science

FTIR TALK LETTER

Vol. 47
November 2026



夕暮れの灯りに包まれ、京の風情と人の往来がゆるやかに溶け合う二寧坂。

FTIRおよび小型卓上試験機を用いた
キウイフルーツの成熟過程における部位別評価 …… P. 2

量子もつれ光子対を利用した赤外分光法 …… P. 7

赤外スペクトル解析のポイント ーアミン編ー …… P. 11

IR発売から70周年 …… P. 16

FTIRおよび小型卓上試験機を用いたキウイフルーツの成熟過程における部位別評価





（地独）神奈川県立産業技術総合研究所 革新的インダストリアルマルチスケールセンサプロジェクト
研究員　佐世 美帆、大川 拓樹

1. はじめに

果実の成熟は、細胞壁多糖類の合成と分解、糖・有機酸の蓄積と変換など、複数の生化学的プロセスが複雑に絡み合いながら進行する現象である。これらの変化は果実全体で一様に起こるのではなく、果実内の組織ごとに異なるタイミングと速度で進行することが植物生理学的に示されている[1,2]。果実の硬さは成熟度を示す指標の一つであり、特にペクチンの脱エステル化や分解がその変化に深く関与することが知られているが[3,4]、その寄与の種類や程度は果実の種類や組織によって異なる。こうした成熟の空間的不均一性を定量的に捉えることは、成熟メカニズムの理解という学術的観点からも意義深く、収穫適期の科学的判断基準の確立という実用的観点からも重要な意味を持つ。

農産物の分光計測の分野では、近赤外（NIR）分光法が非破壊・迅速計測の手段として広く普及しており、糖度の予測モデルは実用レベルで活用されている[5]。しかし、NIR計測では果実全体を透過または散乱した光を積分的に検出するため、得られる情報は基本的にバルク平均である。また、NIR領域では分子の倍音・結合音を観測するためピークが幅広く重なり合い、解析にはケモメトリックス処理が不可欠となる。すなわちNIR計測は、対象物のバルク的な情報を推定することには優れているが、成分の空間的不均一性を分解して観察することには原理的な限界がある。

一方、中赤外（MIR）分光法は分子の基本振動を直接捉えるため、化学結合に由来する識別性の高いピークが得られ、官能基分析や成分の判別・同定に広く用いられている。中赤外領域では水や多くの有機化合物が強い吸収特性を持つことから、生体組織を一般的な透過法で測定することは困難であり、このような対象物には、全反射測定法（ATR）が有効である。ATR法では試料の微小片をプリズム上に圧着するだけで接触面における局所的なスペクトルを取得でき、表面付近の吸収成分のみを観測するため、含水率の高い試料でも簡便に測定することができる[6]。すなわちATR法は、果実内の任意の部位から採取した微小試料を局所的に評価できる手段であり、NIR計測では原理的に得られない空間分解した化学情報の取得に適している。

GHzから赤外域にわたる広帯域センサー開発を行っている当研究室では、その応用の一環として、ATR法を用いた加工食品や果実などの多成分系スペクトル解析を行ってきた[7]。本稿では、ATR法による成分評価と小型卓上試験機EZ Test（島津製作所製）による硬さ評価を組み合わせ、キウイフルーツ2品種の成熟過程における成分と硬さの空間的・時間的推移を追跡した例を紹介する。得られた知見を通じて、成熟の空間的不均一性の把握においてATR法が果たしうる役割を考察する。

2. 実験方法

福岡県の農園にて栽培されたキウイフルーツ2品種、国産品種「甘うぃ（Amawi）」および主力品種「ヘイワード（Hayward）」を対象とした。サンプリングは5月から11月の成熟過程に行われた。Amawiは10月に収穫された。Haywardは5月から7月の間に成長調整剤（フルメット液剤）が使用され、11月に収穫された。図1に各月に提供された果実の断面を示す。サンプリング後は冷蔵保管し、5日以内に実験を行った。

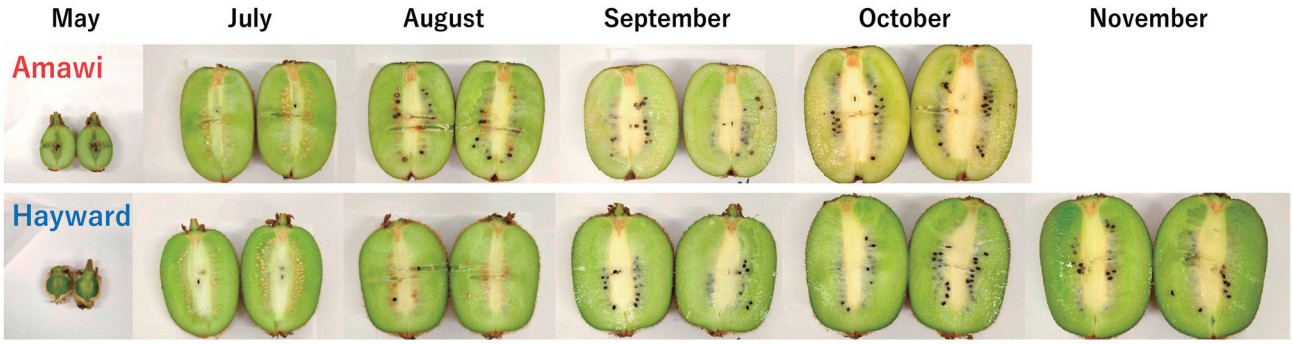


図1　甘うい（Amawi）・ヘイワード（Hayward）の各月における果実断面の様子

● 突き刺し試験による力学的物性評価

小型卓上試験機EZ Testおよびφ3 mmの進入弾性治具を用いて突き刺し試験を行った。図2に突き刺し試験の概要を示す。果実の赤道部外側から中心に向かって一定速度10 mm/minで直径の75%地点まで貫入し、深度に応じた試験力（N）を連続記録した。各深度における試験力を果肉の貫入抵抗と考えて比較した。本稿ではこの値を「硬さ」と定義する。この方法では、硬さの空間的な分布を一連の試験曲線から把握することができる。

本研究では、複数時点・複数部位にわたる多数のサンプルを継続的に処理するにあたり、操作の均一性と処理効率を確保する観点から、果肉片を切り出してプリズム上に圧着するだけという簡便な手順でスペクトルを取得した。この条件では微量の低分子化合物よりも、試料組成の大部分を占める水や多糖由来の吸収が支配的に観測される。本稿では、選定した波数における吸光度比を成分変化の指標として算出し、成熟過程における推移を分析した結果を紹介する。

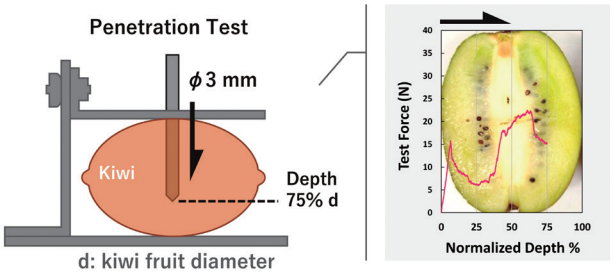


図2　EZ Testを用いたキウイフルーツ突き刺し試験の外観と深度別貫入抵抗曲線

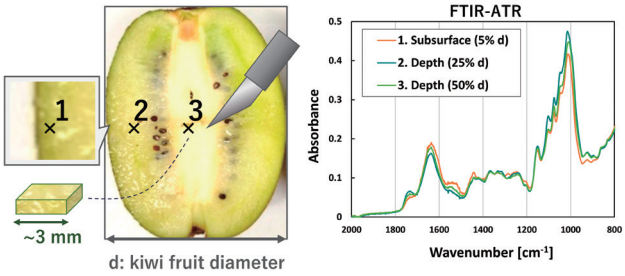


図3　ATR測定部位（深度5 %・25 %・50 %）と各部位のスペクトル例

● ATR法による化学成分評価

赤外分光計IRTracer-100（島津製作所製）および一回反射型ATRアクセサリー QATR 10（ダイヤモンドプリズム）を用いて測定を行った。図3に果実のサンプリング位置の目安と各部位のATRスペクトルの例を示す。

果肉のサンプリング部位は深度5 %地点（果皮付近）、深度25 %地点（外果肉部）、深度50 %地点（芯部）の3地点とした。各部位から約3 mm四方・厚さ約1 mmの果肉片を切り出し、プリズム上に一定トルクで圧着・破砕した状態で測定した。測定条件は波数範囲4000〜400 cm^{-1}、分解能4 cm^{-1}、積算回数30回とした。

3. 結果と考察

キウイフルーツの成熟過程（7月〜11月）における硬さの推移を、深度別（5 %、25 %、50 %）にHaywardおよびAmawiで比較した結果を示す（図4）。なお、5月は果実サイズが小さく測定精度への影響が懸念されたため、解析対象から除外した。

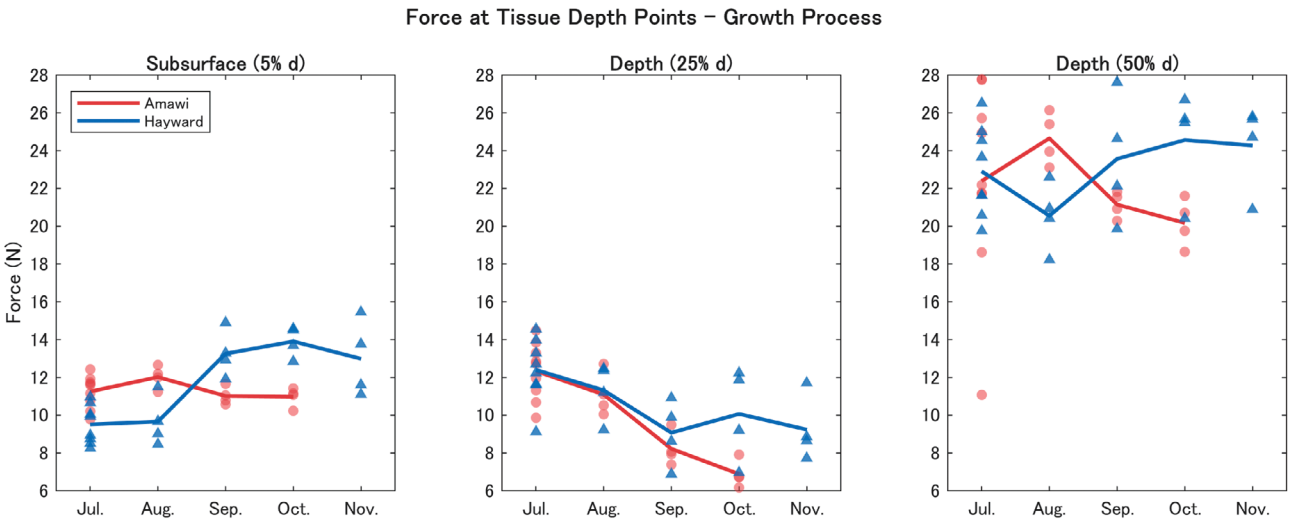


図4　成熟過程におけるキウイフルーツ内部の硬さ推移

- **深度5％果皮付近の硬さ：**

Haywardは7月から8月にかけてほぼ横ばいで推移した後、8月から9月にかけて上昇し、以降は収穫期まで硬さを維持した。一方、Amawiでは7月から10月にかけてほぼ横ばい、あるいは緩やかな減少傾向を示した。収穫時点における硬さはAmawiの方が低い値を示した。

- **深度25％外果肉部の硬さ：**

両品種ともに7月から収穫期にかけて緩やかな減少傾向を示した。収穫時点における硬さはAmawiの方が低い値を示した。

- **深度50％芯部の硬さ：**

Haywardは8月にわずかな低下傾向がみられたが、全体として収穫期までほぼ横ばいの高い値を維持した。これに対し、Amawiは8月以降に低下傾向がみられた。収穫時点における硬さはAmawiの方が低い値を示した。

以上のように、突き刺し深度によって硬さの推移が異なることを確認した。さらに、HaywardとAmawiの品種間でも異なる傾向を捉えており、果実全体の平均値では識別しにくい成熟過程の特徴が明らかとなった。このことは、空間的な硬さ情報を含む突き刺し試験曲線が、品種の特徴を反映した成熟評価の指標として機能することを示している。

次に、赤外吸収特性の推移を分析した結果の一例を示す（図5）。ATR法では試料とプリズムの密着具合が測定ごとに変動し、吸光度の絶対値が変化するため、定量的な比較には吸光度比を用いることが有効である[8]。本研究では一定トルクによる圧着で実験操作を統一するとともに、選定した2波数における吸光度比を算出し、成熟過程における推移を比較した。吸光度比の算出に用いた波数とその帰属を以下に示す。

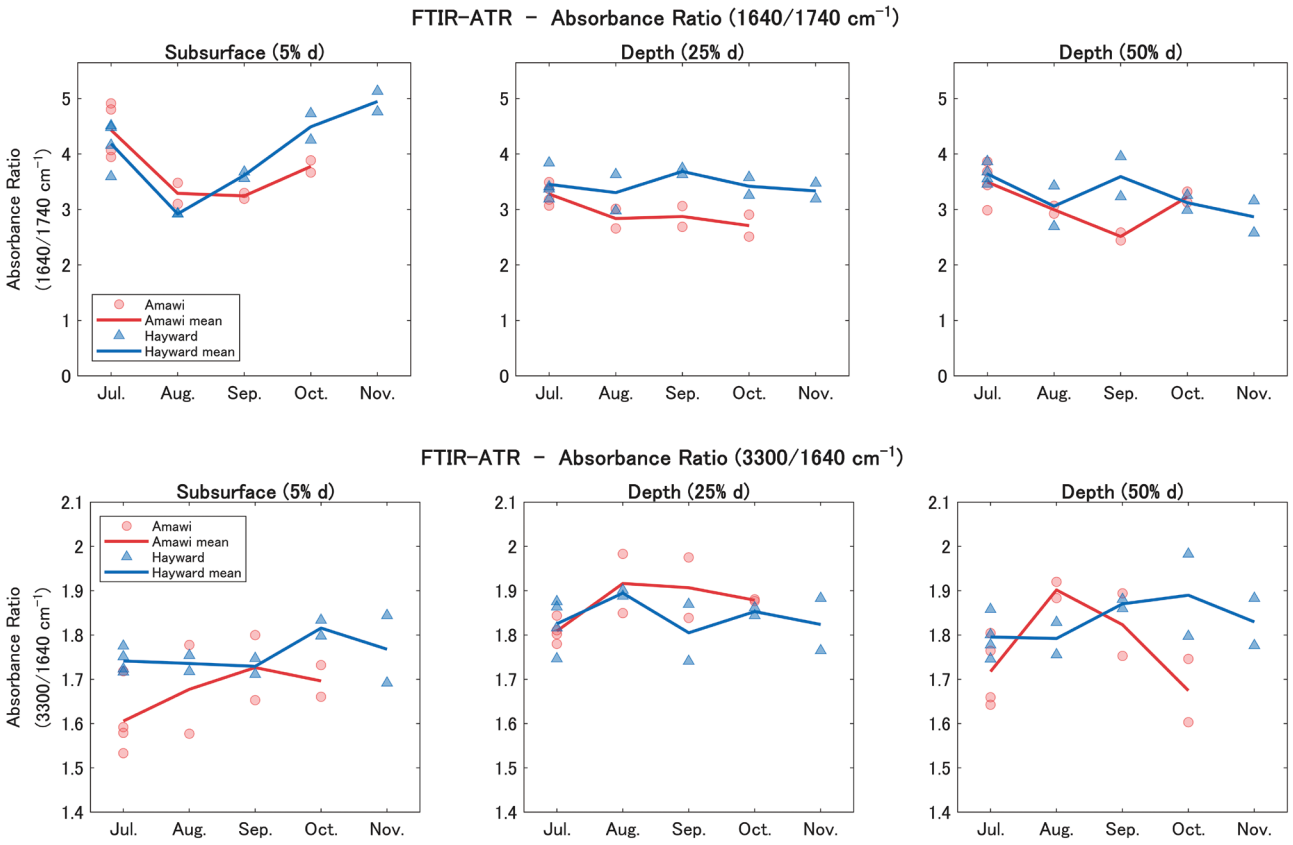


図5　成熟過程におけるキウイフルーツ内部の赤外吸収特性の推移
①上段：吸光度比1640 cm^{-1}/1740 cm^{-1}　②下段：吸光度比3300 cm^{-1}/1640 cm^{-1}

● **吸光度比① 1640 cm^{-1}/1740 cm^{-1}：**

1640 cm^{-1}は水のO-H変角振動が主体であるが、脱エステル化によって生じたペクチンのカルボキシレートCOO^-伸縮（約1610～1620 cm^{-1}）が重なる領域でもある。1740 cm^{-1}はメチルエステル化ペクチンのC=O伸縮などに由来する。この比の主要な寄与としては、ペクチンの脱エステル化の程度を反映する指標と考えられる[9,10]。

● **吸光度比② 3300 cm^{-1}/1640 cm^{-1}：**

3300 cm^{-1}は水・多糖・タンパク質などに含まれる水酸基のOH伸縮振動に由来し、水分や有機酸成分の総合的な指標として用いた[6,12]。

● **吸光度比①の推移：**

深度5％および25％においては硬さの推移と概ね対応した傾向が認められ、収穫時点における吸光度比はAmawiの方が低い値を示した。これらの部位では硬さの変化とペクチンメチルエステラーゼ（PME）などの細胞壁修飾酵素の活性が連動している可能性が示唆された[3]。一方、深度50％（芯部）においては硬さの推移との対応関係は認められず、両品種ともに硬さの変化とは独立した挙動を示した。このことから、芯部の硬さに寄与する因子は、ペクチンの構造変化とは異なる要因によるものと考えられた。

● **吸光度比②の推移：**

深度5％および25％においては両品種間で大きな差は認められず、深度50％（芯部）においては硬さの推移と対応した傾向がみられた。特にAmawiの芯部で見られた7月から8月にかけての上昇とそれ以降の減少という傾向が、硬さの推移と対応していた。この部位の硬さには、芯部における組織の水分状態や有機酸組成の変化が寄与している可能性が示唆された。

以上の結果より、キウイフルーツの成熟過程では組織ごとに異なるタイミングと速度で成分および物性に変化が生じていることが示された。また、果実の硬さに寄与する成分因子は部位によって異なり、外果肉部（深度5％・25％）ではペクチンなど細胞壁多糖の構造変化が支配的である一方、芯部（深度50％）では水分状態や有機酸組成の変化が主要な因子である可能性が示唆された。

果実をバルク平均した情報のみで評価する場合、このような内部成熟の空間的不均一性が計測精度を低下させる要因となりうる。本知見は、NIRケモメトリックスモデルが品種や産地を超えて汎化しにくい一因を説明しうる可能性を示している。ATR法による部位別計測は、バルク平均に留まるNIR計測では得られない成分の空間分布情報を与える手段として有効であった。

4. おわりに

本研究では、FTIRと小型卓上試験機を組み合わせ、キウイフルーツ2品種（HaywardおよびAmawi）の成熟過程を部位別・経時的に評価した。この実験により、同一果実内でも突き刺し深度ごとに硬さおよび赤外吸収特性の推移パターンが異なり、成熟が部位によって異なるタイミングと速度で進行することが示された。また、硬さに寄与する成分因子が部位によって異なることが分光データから示唆された。

植物細胞壁の硬さはペクチン・セルロースなどの多糖構造、水分状態、イオン濃度など複数の要因が複雑に絡み合った結果として決まる。赤外分光法では、主要成分を分離された吸収特性として観測することができるため、どの因子が支配的かを部位別・時期別に議論する手がかりを与える[11]。簡便な前処理のみで微小な局所試料を連続的に処理できるATR法の利便性は、このような継続的な評価に適していると考えられる。

一方で課題も残る。ATR法は試料の表面付近（0.5 - 5 μm程度）の情報に限定されるため、細胞レベルの不均一な構造を持つ生体試料において、切り出した微小試料がその部位を代表しているかという問いは常に意識する必要がある。測定プロトコルの標準化とデータ解釈の指針を整備していくことが、ATR法を農産物評価に活用する際の信頼基盤となり、その活用を広げることにつながると期待している。

謝辞

本研究を進めるにあたり、成熟過程のキウイフルーツを継続的にご提供いただいた、白石 喜久美 様、白石 凌太 様に感謝申し上げる。

参考文献

［1］ D. Sanhueza, I. Balic-Norambuena, P. Sepúlveda-Orellana, S. Siña-López, A.A. Moreno, M.A. Moya-León, S. Saez-Aguayo: Front. Plant Sci., 15, 1422917（2024）.
［2］ H. Zhang, L. Xiao, S. Qin, Z. Kuang, M. Wan, Z. Li, L. Li: Plants, 13, 3561（2024）.
［3］ S. Wolf, G. Mouille, J. Pelloux: Mol. Plant, 2, 851（2009）.
［4］ Q. Su, X. Li, L. Wang, B. Wang, Y. Feng, H. Yang, Z. Zhao: Foods, 11, 3518（2022）.
［5］ 尾崎幸洋, 分光法シリーズ2 近赤外分光法,講談社（2015）.
［6］ 古川行夫, 分光法シリーズ4 赤外分光法, 講談社（2025）.
［7］ 佐世美帆, 大川拓樹, 小川剛伸, 田中充, 河野行雄, "酸素の赤外吸収特性を利用した、野菜や果実のテクスチャー評価", 第76回日本生物工学会大会, 1Lp06（2024）.
［8］ 島津製作所, "ATRの注意点 その2：定量分析", FTIR TALK LETTER, 2（2004）.
［9］ M.H.G. Canteri, C.M.G.C. Renard, C. Le Bourvellec, S. Bureau: Carbohydrate Polymers, 212, 186（2019）.
［10］ M. Szymanska-Chargot, A. Zdunek: Food Biophysics, 8, 29（2013）.
［11］ R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle（荒木峻, 益子洋一郎, 山本修, 鎌田利紘 訳）, 有機化合物のスペクトルによる同定法第7版, 東京化学同人（2006）.
［12］ A. Largo-Gosens, M. Hernández-Altamirano, L. García-Calvo, A. Alonso-Simón, J. Álvarez, J.L. Acebes: Front. Plant Sci., 5, 303（2014）.

量子もつれ光子対を利用した赤外分光法

基盤技術研究所
徳田 勝彦

1. はじめに

島津製作所が初めて赤外分光光度計を発売してから70周年を迎え、長年に渡り様々な技術開発が行われ、今日ではお客様のご要望にお応えできる赤外分光装置がラインナップされています。本稿では、新しい技術として従来の赤外分光法に量子技術を適用した分光法を紹介します。赤外域の光源や検出器を使用することなく可視域の光源と検出器を用いて赤外分光が可能になる技術です。分光には、量子もつれ状態にある赤外領域の光子と可視域の光子の光子対を利用します。この光子対は強い相関があり、量子干渉現象を介して赤外光子の変化をもう一方の可視光子で計測できます。この原理により可視検出器による赤外分光が可能となります。可視検出器は、赤外検出器に比べて感度が高く、ダイナミックレンジも広いことから、これまでにない分光法として期待されています。この赤外分光法は、2016年にシンガポールの研究機関によって実験的に示されました[1]。その後、フーリエ変換を利用した分光法などの研究開発が進められています[2,3,4]。当社は、本分野で最先端の研究をされている京都大学竹内繁樹教授と共同してこの原理を利用した量子赤外分光技術の開発に取り組んでいます。

2. 量子もつれ光子対の発生

量子もつれ光子対を発生させるためには、基になるレーザー光とそのレーザー光から光子対を発生させる波長変換素子が必要になります。その発生の様子を図1に示します。波長変換結晶にレーザー光が入射すると結晶の波長変換能力により図2に示すエネルギーの関係を持つ2つの光（光子対）が同時に発生します。つまり、レーザーの光子エネルギーが2つの光子に分配される形で波長変換が行われ、互いに相関のある量子もつれ状態の光子対が発生します。一般的に基になるレーザー光をポンプ光子（添え字p）、発生する光子対をアイドラ光子（添え字i）、シグナル光子（添え字s）と呼びます。光子のエネルギーは、$E=h\nu$、$\omega=2\pi\nu$（h：プランク定数、ω：角振動数）で表され、図2のように3つの光のエネルギー（角振動数）は$\omega p=\omega s+\omega i$の関係になります。この過程は自発的パラメトリック下方変換（Spontaneous parametric down-conversion：SPDC）と呼ばれます。エネルギーの分配の仕方は波長変換条件によって決めることができ、赤外領域の光子と可視領域の光子を発生させることができます。

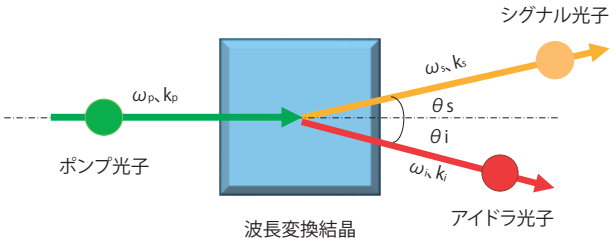


図1　量子もつれ光子対の発生

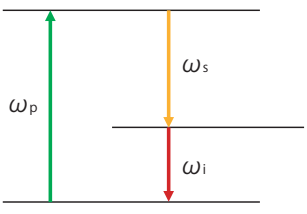


図2　量子もつれ光子対のエネルギー相関

波長変換結晶には様々な結晶がありますが、本稿ではMgOドープストイキオメトリックタンタル酸リチウム結晶（MgOドープStoichiometric LiTaO3：MgSLT）を用いた擬似位相整合（Quasi-Phase-Matching：QPM）型の素子を使用します。QPM素子は、図3に示すように強誘電体の自発分極をある周期（Λ）で人工的に反転した素子です。詳細な説明は省略しますが、発生する光の波長と周期には相関があり、周期を調整することにより任意の波長を持つ光子対を発生することができます。QPM素子の設計・製造技術は島津製作所保有の技術であり、分光したい領域に合わせて量子もつれ光子対発生光源の作製が可能です[5,6]。

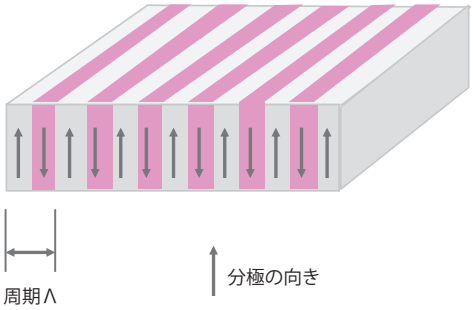


図3　擬似位相整合素子の概要

3. 量子赤外分光の原理

量子赤外分光の概要を図4に示します。レーザー光源からのポンプ光が2つの波長変換素子に照射されることで、赤外光子（アイドラ光子）と可視光子（シグナル光子）が各々の素子から発生します。2つの素子間には、赤外光子と可視光子が別々の光路を通るように光学系が組まれています。波長変換素子1で発生した光子対は前述の光路を通って波長変換素子2に入射します。波長変換素子2からは、波長変換素子1で発生して波長変換素子2を通ってきた光子対と波長変換素子2で発生した光子対が出てくることになります。これらの光子を波長変換素子2の外から観測すると、その光子が波長変換素子1で発生したのか波長変換素子2で発生したのかの区別がつかない状態（識別不能状態）で観測されます。量子論的には、このような状態の時に量子干渉という現象が起こります。この現象は、2つの波長変換素子で起こる量子もつれ光子対発生の物理過程同士の干渉であり、ポンプ光、可視光、赤外光の光路長差に応じて観測される光強度が変動（干渉）します。可視光あるいは赤外光のいずれかを観測することで量子干渉の変動を捉えることができます。一方で、図4に示すように赤外光路に赤外吸収試料を挿入すると識別不能性が弱まり干渉強度が減少します。量子赤外分光では、この量子干渉の強度変化を可視光で計測し、その変化量から赤外光の吸収量を求めることができます。図4では、可視光路に移動鏡を設置して位相差を設けています。これにより従来型FTIRと同様に量子干渉信号をフーリエ変換し広帯域の赤外スペクトルを取得することが可能になります。

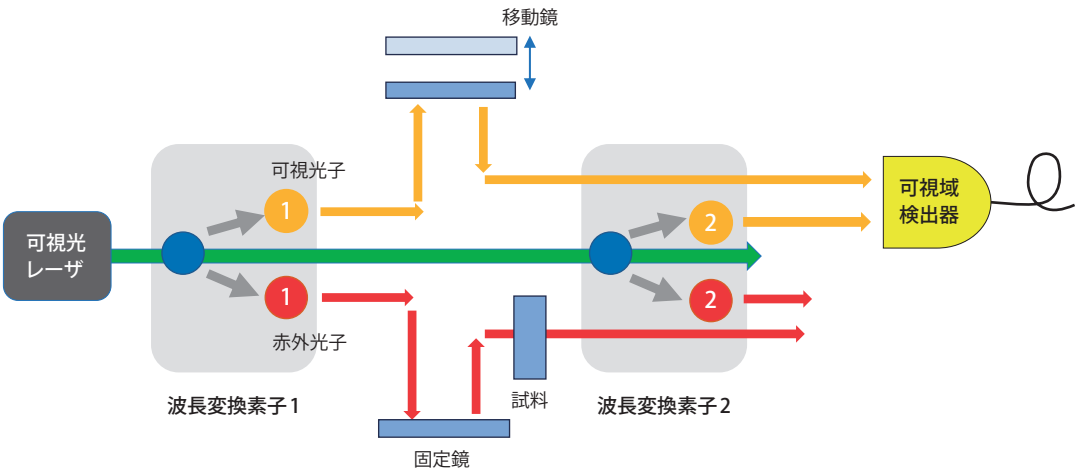


図4　量子赤外分光の原理

4. 量子赤外分光の実際

量子赤外分光の原理を利用した測定例を図5に示します。当社の波長変換素子を利用して京都大学の竹内グループで量子赤外分光測定が行われた例です[7]。前項で説明をしたフーリエ型の分光法の原理を用いて計測されています。測定サンプルは、UV溶融石英、ポリスチレンフィルム、エタノールです。従来FTIRと比較をして良い一致が見られています。

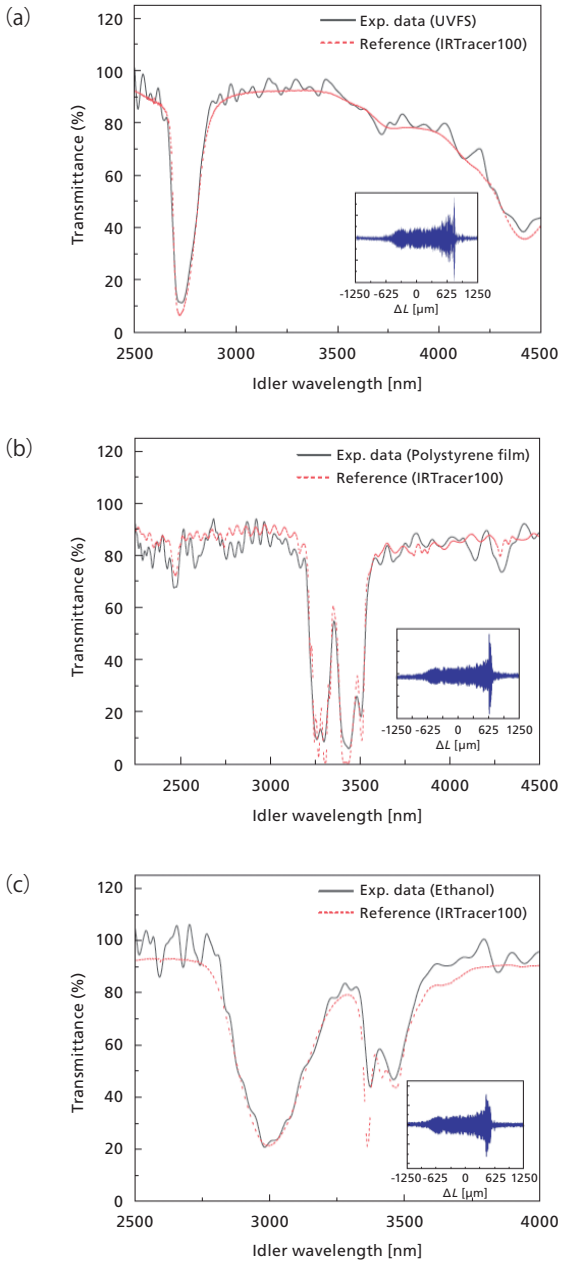


図5　広帯域フーリエ型量子赤外分光の例（参考文献［7］からの引用）
測定サンプルは、（a）UV溶融石英、（b）ポリスチレンフィルム、（c）エタノール

また、可視検出器の広いダイナミックレンジを利用した吸光度特性の結果を図6に示します。吸光度（A）は、$A=-\log_{10}(T)$で定義され、Tは透過率を示し、透過率が0.1 %（10^{-3}）の際に吸光度は3となります。図6は、波数3337 cm^{-1}付近において光学濃度（Optical Density：OD値）が既知のGe基板を用いて吸光度を計測した例です。光学濃度は、$OD=-\log_{10}$（光の減衰率）で表されて、OD3では1/1000の減衰量を示します。OD値と吸光度は比例の関係になります。図6の結果より、従来FTIRでは吸光度3程度が限界と言われていますが、量子赤外分光では、吸光度4までの直線性が得られています。量子赤外分光は、高吸光度分光計測が可能であり新しい測定装置として期待されます。

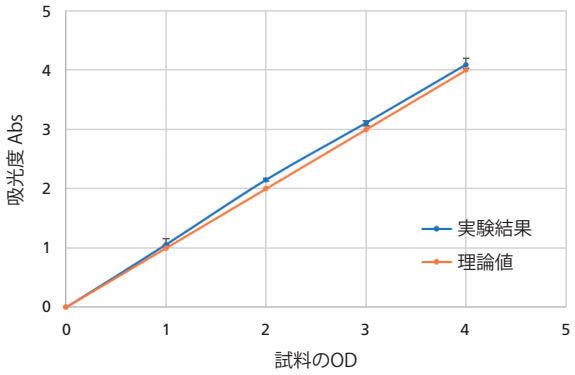


図6　吸光度計測の結果

5. 小型化への挑戦

可視域の光源、検出器を利用する量子赤外分光法の利点として、光路に平面光回路（Planar Lightwave Circuit：PLC）を利用でき、装置全体の小型・堅牢化が可能である点が挙げられます。平面光回路は、光を閉じ込めて伝搬する光導波路を平面基板上に形成した図7のような構造の光回路になります。平面光回路は半導体プロセス手法を用いて基板上に形成することが可能であり、空間伝搬光学系では必須のミラー調整機構が不要になり、装置全体の小型化が図れます。また、調整機構の経時的なドリフトによる光軸のズレもなくなり光学系の堅牢化が可能です。小型化には段階的な技術開発が必要になりますが、最終的には手のひらサイズの赤外分光装置が実現できるのではないかと期待をしています。

小型化が進めば、現場での利用が拡大し、製造インラインモニタ、製造ラインの品質管理（QA）など現場でも利用されるようになることが期待されます。さらに、一般においても学校教育（例えばフィールドでの岩石特定）、家庭での食材の分析など赤外分光が身近な手法として受け入れられる可能性もあります。当社では、2025年の大阪・関西万博で開催された「エンタングル・モーメント［量子・海・宇宙］×芸術」の展示において、京都大学「光子のふしぎと光量子センシング」展示ブースに量子もつれを利用した分光装置として手のひらサイズの量子赤外分光装置のコンセプトモデル（図8）を出展しました。展示には社内外の多くの方にご協力をいただきました。感謝申し上げます。1週間の期間展示でしたが、来場者数は28,935人となり、お子様をはじめ非常に多くの方に興味を持っていただきました。

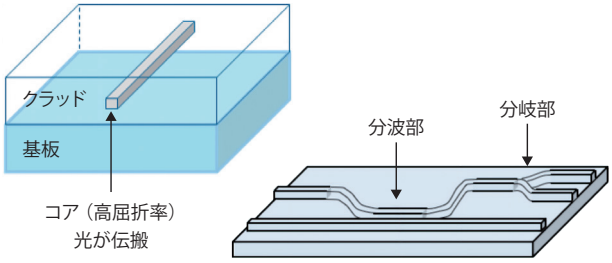


図7　平面光回路の例



a）超小型赤外分光装置コンセプトモデル



b）展示ブースの様子
左：コンセプトモデル　右：IRSpirit-X

図8　大阪・関西万博2025展示コンセプトモデル

6. まとめ

量子もつれ光子対を利用した赤外分光法について紹介をしました。可視検出器で赤外分光ができる利点を活かして今後も開発を進めていきます。将来は、さらなる小型化により新しい市場が拓ける可能性があります。また、最近では本技術を利用したイメージング技術の研究も進められており[8]、可視イメージセンサによる赤外イメージングの実現にも期待が高まっています。

謝辞

本研究の一部は、文部科学省光・量子飛躍フラッグシッププログラム（Q-LEAP）JPMXS0118067634により行われました。京都大学の竹内繁樹教授、岡本亮准教授、向井祐助教、田嶌俊之特定研究員、及び竹内研究室の皆様には共同研究及び量子技術に関するご指導に対し感謝申し上げます。

参考文献

［1］D A.Kalashnikov, A V. Paterova, S P. Kulik and L A. Krivitsky : Infrared spectroscopy with visible light, Nature photonics, vol.10, 98-101 2016

[2] Y. Mukai, M. Arahata, T. Tashima, R. Okamoto, and S. Takeuchi : Quantum Fourier-Transform Infrared Spectroscopy for Complex Transmittance Measurements, Phys. Rev. Applied, 15, 034019 2021

[3] Y. Mukai, R. Okamoto, and S. Takeuchi : Quantum Fourier-transform infrared spectroscopy in the fingerprint region, Opt. Express, vol.30, No.13, pp. 22624-22636 2022

[4] C. Lindner, J. Kunz, S J. Herr, S. Wolf, J. Kießling, and F. Kühnemann : Nonlinear interferometer for Fourier-transform mid-infrared gas spectroscopy using near-infrared detection, Opt. Express Vol. 29, No.3, pp. 4035-4047 2021

[5] 西 亮介, 井上 和哉, 門倉 一智, 久光 守, 徳田 勝彦：高出力レーザ用QPM 波長変換デバイス“PPMgSLT” の開発, 島津評論, 71, 25（2014）

[6] 久光 守, 徳田 勝彦：量子もつれ光子対により分子の「指紋」を見分ける技術, 日本赤外線学会誌, 第34号, 第2号 36-45 2025

[7] T. Tashima, Y. Mukai, M. Arahata, N. Oda, M. Hisamitsu, K. Tokuda, R. Okamoto, and S. Takeuchi: Ultra-broadband quantum infrared spectroscopy, Optica, 11(1), 81-87 (2024)

[8] G B. Lemos, V. Borish, G D. Cole, S. Ramelow, R. Lapkiewicz, and A. Zeilinger : Quantum Imaging with Undetected Photons, Nature vol. 512, pages409–412 2014

赤外スペクトル解析のポイント
ー アミン編 ー

分析計測事業部 Solutions COE
西倉 瀬里

1. はじめに

前号（FTIR TALK LETTER Vol. 46）では、窒素原子と結合する水素原子の数に着目したアミドの分類方法を解説しました。また、ナイロンとタンパク質の区別や、分子構造の違いによるナイロンの識別方法を紹介しました。今回は、アミノ基を持つアミンの分類方法、応用編として分析活用例を紹介します。

2. アミンの分類と赤外吸収の特徴

図1にアミンの赤外スペクトルの主なピーク位置を示します。アミンは、アンモニアの水素原子を炭化水素基で置換した化合物の総称で、赤外スペクトルはN-HやC-Nに由来するピークを持ちます。前号で解説したアミドと同様に、アンモニアの水素原子が置換された数によって1級 ～ 3級に分類されます。

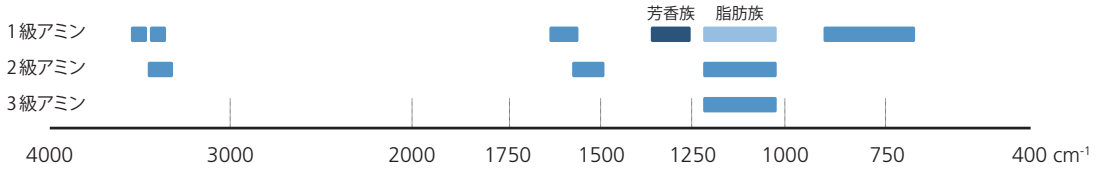


図1　アミンの赤外スペクトルの主なピーク位置

図2に1級アミンであるn-ブチルアミンの赤外スペクトルを示します。1級アミンはアンモニアの水素原子が1つ置換されているため、NH_2を持つ化合物です。3500 cm^{-1}付近と3400 cm^{-1}付近にNH_2伸縮振動に由来する2つのピークが見られます。また、1640 ～ 1560 cm^{-1}にNH_2面外変角振動、900 ～ 650 cm^{-1}にCH_3の面外変角振動のピークが見られます。さらに、C-N伸縮振動のピークが、脂肪族では1230 ～ 1030 cm^{-1}に現れます。芳香族の場合は1360 ～ 1250 cm^{-1}に現れます。

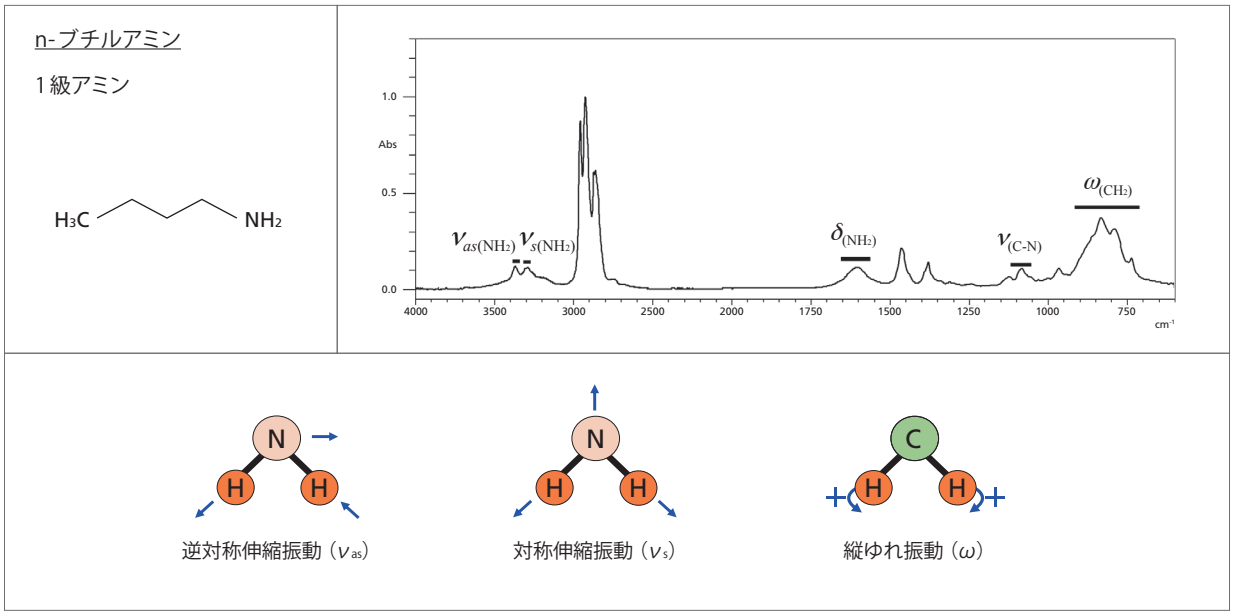


図2　1級アミンの赤外スペクトルの例と代表的なピークの帰属

図3に2級アミンであるジブチルアミンの赤外スペクトルを示します。2級アミンは、アンモニアの水素原子が2つ置換されているため、3540 ～ 3310 cm^{-1} NH伸縮振動に由来する1本のピーク、C-N伸縮振動に由来する1230 ～ 1030 cm^{-1}のピークによって特徴づけることができます。1580 ～ 1490 cm^{-1}には、NH面内変角振動に由来する分子振動の吸収もありますが、強度が弱いピークであるため赤外スペクトルから確認することは困難です[1]。

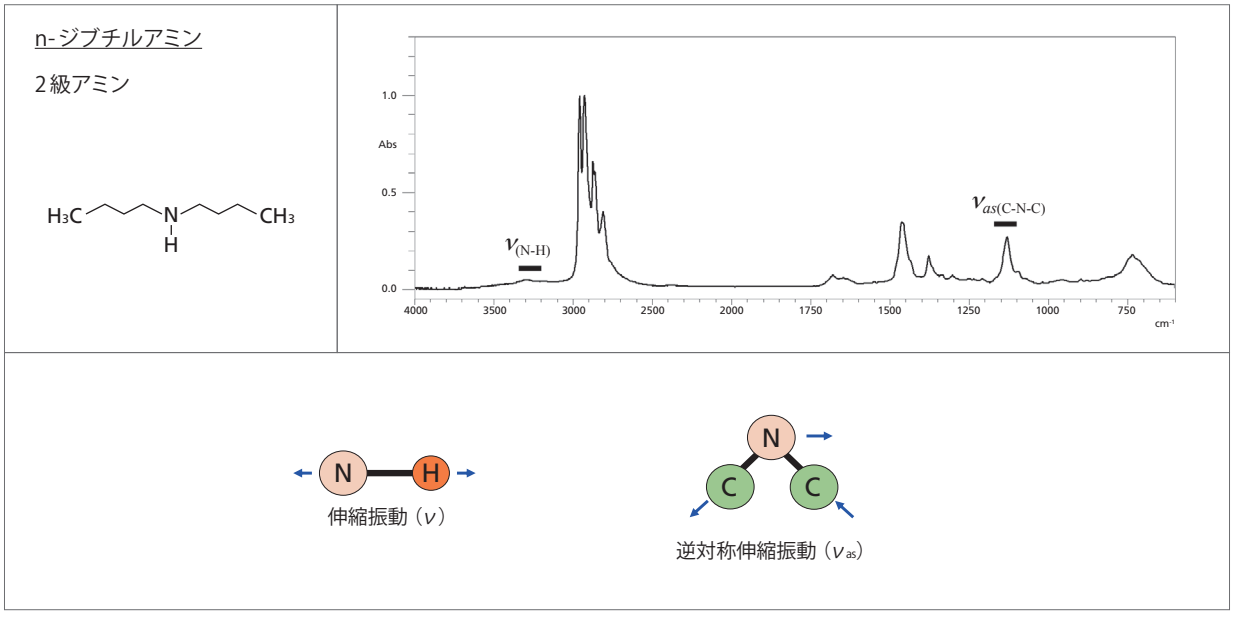


図3　2級アミンの赤外スペクトルの例と代表的なピークの帰属

図4に3級アミンである、トリエチルアミンを示します。3級アミンはアンモニアの水素原子がすべて置換されているため、N-H結合に由来する赤外吸収は見られません。1230 ～ 1030 cm^{-1}の領域にはC-N伸縮振動に由来する2本のピークが見られますが[2]、他のピークと重なることも多く、赤外スペクトルから3級アミンを判別するのは難しい場合が多いです。

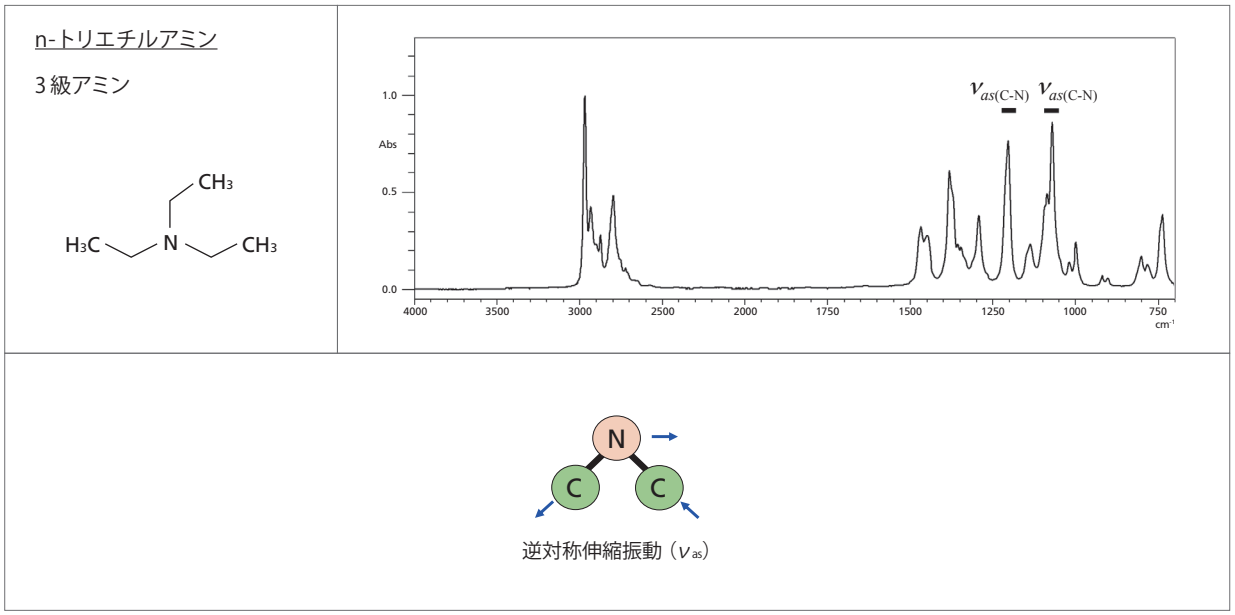


図4　3級アミンの赤外スペクトルの例と代表的なピークの帰属

3. アミン化合物の活用例

アミン化合物は医薬品や農薬、化粧品、染料、ガス処理など、様々な分野で使用されています。今回はポリマーや樹脂への添加剤としての用途を紹介します。

● 光安定剤

樹脂製品は、紫外線による劣化を防止するために光安定剤を添加する場合があります。アミン系の光安定剤である、ヒンダードアミン系光安定剤（HALS）は紫外線エネルギー自体を遮断する機能はありません。しかし、分子の光酸化反応の初期段階で発生する有害なラジカルを捕捉・中和し無害化することで、ポリマーの主鎖の切断を抑制します。図5にHALSの赤外スペクトルの例を示します。3350 cm^{-1}付近にアミノ基のピークを確認できます。

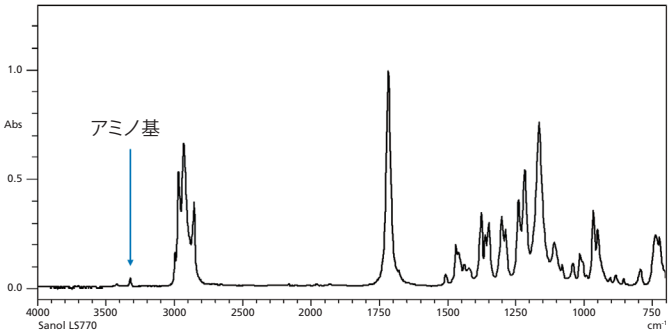


図5　ヒンダードアミン系光安定剤（HALS）の赤外スペクトルの例

● 硬化剤

アミン化合物はエポキシ樹脂の硬化反応に使用されます。アミン化合物との反応を利用したエポキシ樹脂の接着剤（アミン硬化剤）は、高い接着性から、金属、プラスチック、ガラス、木材など、幅広い用途で使用されています。この硬化反応は、図6に示すように、エポキシ基とアミノ基が反応することで生じます。まず、1級アミンがエポキシ基と反応して2級アミンを形成し、さらに反応が進むと、3級アミンが形成されます。いずれの反応においてもエポキシ基が開環し、水酸基が生成されます。

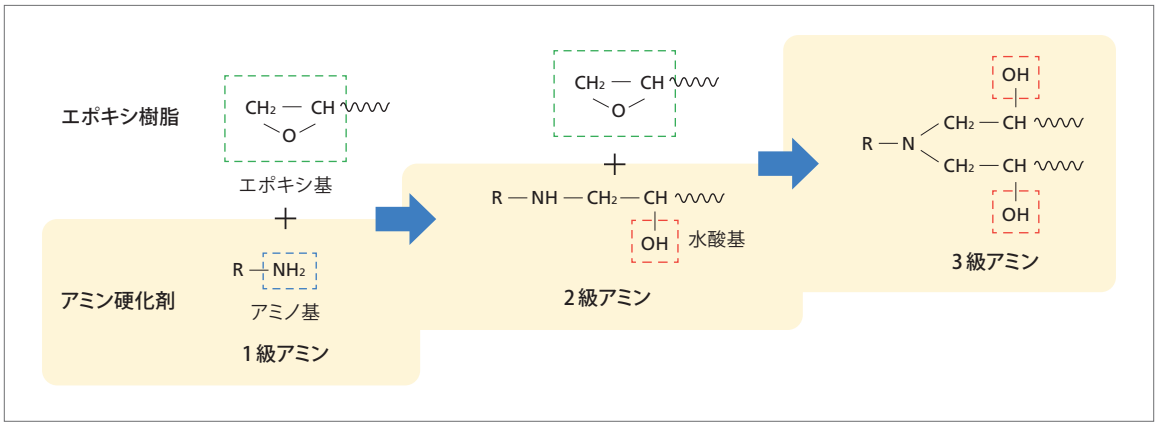


図6　エポキシ樹脂の硬化過程

図7に、エポキシ樹脂とアミン硬化剤の混合直後の赤外スペクトルと硬化後の赤外スペクトルを示します。反応前に比べて反応後は930 ～ 890 cm^{-1}のエポキシ基由来のピークの減少が認められます。また、3600 ～ 3200 cm^{-1}では、硬化剤の由来のアミノ基の消失と水酸基の増加により、シャープなピークから丸みを帯びたピークへと変化し、ピークが強くなっています（図8）。

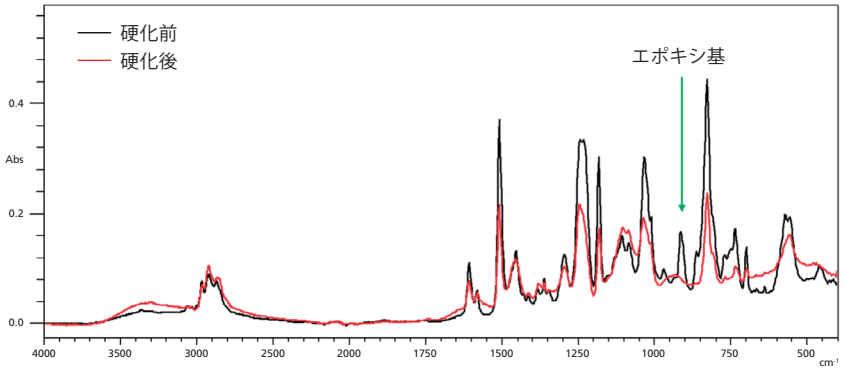


図7　エポキシ樹脂の硬化前後の赤外スペクトル

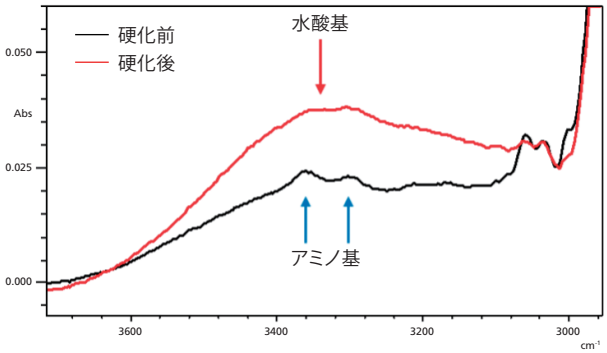


図8　エポキシ樹脂の硬化前後の赤外スペクトル拡大図（3600 ～ 3000 cm^{-1}）

4. まとめ

今回は、アミンの分類方法と活用事例について解説しました。

- アミンは、アンモニアの水素結合が置換された数によって1級アミン、2級アミン、3級アミンと分類されています。
- アミンは、プラスチック等の樹脂の光安定剤として利用されることがあります。
- エポキシ樹脂の硬化剤としてアミンが使用されており、硬化時のエポキシ基とアミノ基の反応が進むことで、エポキシ基が減少し、水酸基の増加が生じます。

次回は、ニトリルとイソシアネートについて取り上げます。

参考文献

［1］中西香爾, P.H. Solomon, 古舘信生,「赤外吸収スペクトル―定性と演習―」, 南江堂（1987）.

［2］P. J. Larkin “Infrared and Raman Spectroscopy” , Elsevier（2018）.

IR 70th ANNIVERSARY

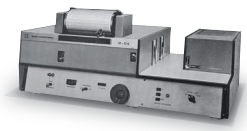
1956 AR-275

ダブルビーム自記赤外分光光度計を発売



1965 IR-27G

赤外分光光度計に回折格子を搭載し、
メンテナンス性を大幅に向上



1981 IR-435

データプロセッサを内蔵し、パラレルライン
プリンタを赤外分光光度計に採用



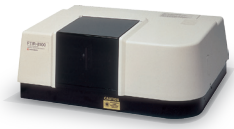
1984 FTIR-4000

分散型より光量の利用率を大幅に高めた
フーリエ変換赤外分光光度計（FTIR）



1990 FTIR-8100

大幅な小型化と低価格化と同時に、
多機能・高性能化を実現



2002 IRPrestige-21

当時最高レベルのS/N 40,000:1以上に
除湿機構を搭載したハイエンドFTIR



2008 IRAffinity-1

従来機比 約20 %の小型化を実現し、
異物解析プログラムを搭載



2013 IRTracer-100

S/N 60,000:1の高感度、
0.25 cm^{-1}の高分解測定を実現



2017 IRSpirit

A3サイズ以下、重さ8.5 kgの
小型高性能FTIR



2022 IRXross

ミドルクラスのサイズでありながら、
ハイエンドクラス並のS/Nを実現



2022 AIRsight

赤外分光法とラマン分光法を融合した
オンリーワンの赤外ラマン顕微鏡



2023 AIMsight

広視野カメラを搭載し、簡単に
見る⇒測る⇒判るを実現した赤外顕微鏡



2023 IRSpirit-X

10年保証による信頼性と、すぐに使える
操作性を両立した小型高性能FTIR



2026

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。
なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

株式会社 島津製作所

分析計測事業部
604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

製品情報　価格お問合せ

初版発行：2026年11月　3244-10601-ODPIT