

# 計測技術セミナー

(公社)日本分析化学会と共催

# 分析化学における不確かさ研修プログラム

## 楽しく！ 簡単に！ わかりやすく！

オンライン参加も可能になりましたので、遠方の方も是非ご参加下さい

受講者全員に目が届く  
少数定員

複数の講師が対応

質問  
しやすい！

講義と演習を  
繰り返すので身に着く

受講者一人一人の  
理解度を確認しながら  
進めるので安心！

受講者全員に  
受講証明書を発行

社員教育として  
活用できる！

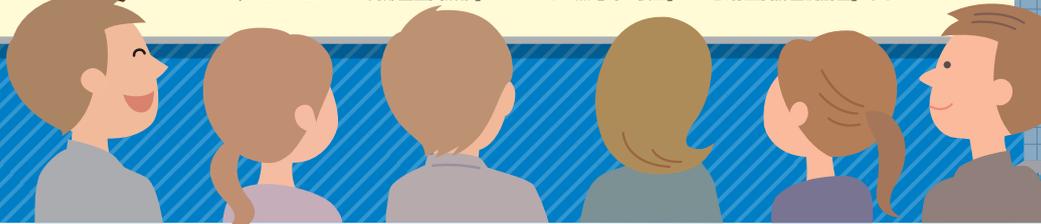
未経験者でも  
簡単に不確かさの計算が  
できるようになる

難しい数式や  
偏微分は  
使いません！

### その他、JEMICで開催しているセミナー

「知っておきたい不確かさの評価法 応用編」  
「不確かさ評価に必要な統計的手法」  
「事例で学ぶ不確かさ：電気編」  
「事例で学ぶ不確かさ：温度編」  
「ISO/IEC 17025：2017内部監査員研修」

「ISO/JIS Q 10012計測器管理規格の解説と活用」  
「質量計の校正と不確かさ評価」  
「一次元寸法測定器の校正と不確かさ評価」  
「温度測定の基礎」「抵抗温度計の校正」  
「熱電対の校正」「放射温度計基礎講座」など



問い合わせ先

日本電気計器検定所 (JEMIC) セミナー事務局

〒108-0023 東京都港区芝浦4-15-7

TEL：03-3451-1205 / E-Mail：kosyukai-tyk@jemic.go.jp

セミナー詳細はこちら [https://www.jemic.go.jp/gizyutu/j\\_keisoku.html](https://www.jemic.go.jp/gizyutu/j_keisoku.html)



標準器・計測器の校正試験については下記へお問い合わせください

日本電気計器検定所 <https://www.jemic.go.jp/>

- JEMIC は、電気、磁気、温湿度、光、時間、長さ、質量、圧力、トルク、力のJCSS校正を行っています。
- JEMIC が発行する国際MRA対応JCSS認定シンボル付き校正証明書は、品質システムの国際規格ISO 90005、自動車業界の国際的な品質マネジメントシステム規格IATF 16949の要求に対応できます。

お客様のニーズに応えるネットワークと、永年にわたる研究を基盤とする実績。校正試験のことなら、JEMICにご相談ください。

### 校正試験実施・窓口

- 本社  
〒108-0023 東京都港区芝浦4-15-7  
Tel.03-3451-6760 Fax.03-3451-6910
- 中部支社  
〒487-0014 愛知県春日井市気噴町3-5-7  
Tel.0568-53-6336 Fax.0568-53-6337
- 関西支社  
〒531-0077 大阪府北区大淀北1-6-110  
Tel.06-6451-2356 Fax.06-6451-2360
- 九州支社  
〒815-0032 福岡市南区塩原2-1-40  
Tel.092-541-3033 Fax.092-541-3036

### JEMICのネットワーク・代表電話

- 本社  
03-3451-1181
- 北海道支社  
011-668-2437
- 東北支社  
022-786-5031
- 中部支社  
0568-53-6331
- 北陸支社  
076-248-1257
- 関西支社  
06-6451-2355
- 関西支社京都事業所  
075-681-1701
- 中国支社  
082-503-1251
- 四国支社  
0877-33-4040
- 九州支社  
092-541-3031
- 沖縄支社  
098-934-1491



JEMICイメージキャラクター  
「ミクちゃん」

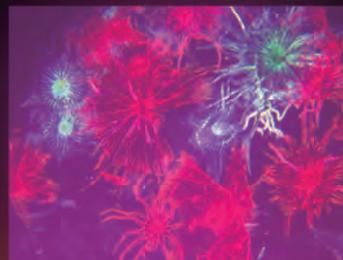
6<sup>th</sup>  
Anniversary

# Welcome to the Next Generation

赤外顕微鏡における「観る」、「測る」、「使う」を再構築、  
顕微赤外測定に新たなイノベーションを創出します。

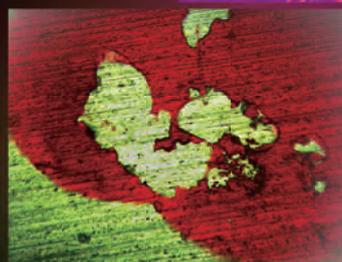
## 「観る」

- ・ 500万画素の高解像度カメラを搭載
- ・ 光学系の改良と電動アイリス機構による高品位な観察画像
- ・ オートフォーカス標準搭載
- ・ スマートモニターによる観察・測定の同時実行
- ・ 各種観察オプションを用意



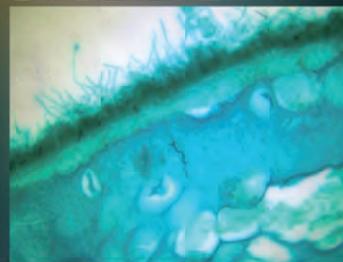
## 「測る」

- ・ 自動XYZステージによる顕微測定の効率化
- ・ スマートマッピングによる革新的な測定
- ・ 光学系及びミッドバンドMCT検出器の改良による感度向上
- ・ 2in1MCT検出器による高空間分解能・高感度測定
- ・ 4検出器搭載可能



## 「使う」

- ・ シンプルで使い易く、初心者でも使えるUI
- ・ IQ IR NAVによる自動試料認識
- ・ 集光鏡スライドイン方式の採用
- ・ 40mm厚試料の反射測定対応
- ・ 設置スペースのダウンサイジング



FT/IR-4X + IRT-5X システム

# IRT-5X

赤外顕微鏡 / Infrared Microscope

IRT-5X について



詳しくはこちらから

光と技術で未来を見つめる

## 日本分光

日本分光株式会社

〒192-8537 東京都八王子市石川町2967-5  
TEL 042(646)4111(内)

日本分光の最新情報はこちらから

<https://www.jasco.co.jp>

日本分光HP



## JASCO

JASCOは日本分光株式会社の登録商標です。  
本広告に記載されている装置の名称および各仕様は、  
改訂のたび予告なく変更することがあります。

エネルギー分散型蛍光X線分析装置

Energy Dispersive  
X-ray Fluorescence Spectrometer

# ALTRACE



## 元素分析の限界を超越する

簡単操作で微量元素を高速に分析。さらなる高感度を求めて、最適光学系設計と当社独自の高速信号処理技術により、蛍光X線分析装置が新しいステージに到達しました。

### 類いなき高感度

- サブppmから%まで広範囲の一斉元素分析を実現
- 1 ppm未満の簡易スクリーニングとして活用
- 粉末・液体試料を溶解や希釈することなく、簡便に分析が可能

### 煩雑な前処理からの解放

- 化学的な前処理なしに分析可能
- 精密分析前の簡易スクリーニングに最適
- 精密分析よりコスト削減・操作性が優位

### 圧倒的な効率性

- 最大48試料搭載の連続自動分析
- 扱いやすいトレイ引き出し方式採用
- 測定中の割り込み分析に対応



詳しい製品情報はこちら

各種標準物質 (RM, CRM)

PFAS関連 (EPA 1633対応など)、RoHS (MCCPs, TBBPA)、REACH規則 (PAHs) など取り扱っております。  
核燃料関連 (ウラン、トリウム、プルトニウム)、環境中放射能標準物質などもございます。

<p><b>ICP-OES/ICP-MS AAS/IC</b></p>	<p><b>固体発光分光分析 蛍光X線 / ガス分析</b></p>	<p><b>物理特性 / 熱特性</b></p>	<p><b>有機標準物質</b></p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>・無機標準液 / オイル標準液</li> <li>・鉄・非鉄各種金属</li> <li>・工業製品 (石炭、セメント、セラミックス等)</li> <li>・環境物質 (土壌、水、堆積物、岩石等)</li> <li>・乳製品、魚肉、穀物等</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・鉄・非鉄各種金属</li> <li>・工業製品 (石炭、セメント、セラミックス等)</li> <li>・環境物質 (土壌、水、堆積物、岩石等)</li> <li>・(乳製品、魚肉、穀物等)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・X線回折装置用 Si powder, Si nitride, 等</li> <li>・粒度分布計用</li> <li>・熱分析用 DSC (In, Pb, 等)</li> <li>・粘度測定用</li> <li>・膜厚分析用</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・製薬標準物質 SPEX, LGC, EP, USP, TRC, MOLCAN</li> <li>・認証有機標準液</li> <li>・ダイオキシン類 / PCB</li> <li>・有機元素計用標準物質</li> <li>・Cayman Chemical</li> </ul>

Cole-Parmer 社 (旧 SPEX 社) 前処理機 (フリーザーミル・ボールミル)

凍結粉碎機 (Freezer / Mill)

粉碎容器にインパクトター (粉碎棒) とサンプルを一緒に入れ、液体窒素にてサンプルを常時凍結させて運転を開始します。インパクトターを磁化させ、往復運動させる事による衝撃でサンプルを粉碎します。やわらかいサンプルや熱に弱い生体サンプルに最適です。

〈サンプル例〉プラスチック、ゴム、生体サンプルなど、  
〈使用例〉ICP, XRF, GC, LCの前処理 DNA/RNAの抽出の前処理

ボールミル (Mixer / Mill)

SPEX独自の8の字運動により、効率的な粉碎、混合が可能。サンプルに合った粉碎容器、ボールを選択可能。

〈サンプル例〉岩石、植物、錠剤、合金など  
〈使用例〉ICP, XRFの前処理 メカニカルアロイニング



日本バイオテクノロジー認証機構 (JBCO) 技能試験



(一社) 日本バイオテクノロジー認証機構 (JBCO) ではISO / IEC 17043 (技能試験提供者認定) に準じて各種技能試験を開催しております。全ての技能試験についてフォローアップセミナーが開催されるのが大きな特色で、試験結果に対する追跡が可能です。また理化学試験、リアルタイムPCR試験については余剰試料の頒布を行っており、その後の精度管理及びメソッド開発などへ活用できます。



〈現在頒布中の余剰サンプル〉  
理化学試験：栄養成分・ヒスタミン  
さばしょう油煮：(プルトップ缶、容量約80g)  
さば水煮：(プルトップ缶、容量約80g)  
・リアルタイムPCR (DNAコピー数の測定)  
プローブ法 or インターカレータ法

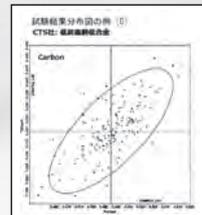
海外技能試験輸入代行サービス

技能試験 (外部精度管理) とは・・・

技能試験提供機関が提供する未知サンプルを分析することによって、分析者の分析技能を測るテストです。分析能力に関して中立的な評価が得られ、国内外の参加試験所と分析能力の比較が出来ます。

〈メーカー/サンプル例〉

- ・LGC (ドイツ)：環境・食品・飲料・アルコール・微生物・化粧品・製薬・オイル・飼料
- ・CTS (アメリカ)：鉄鋼・非鉄・樹脂
- ・iis (オランダ)：ポリマー (化学試験)・繊維・化粧品
- ・NIL (中国)：ポリマー (化学試験・物性試験) 鉄鋼原料
- ・NSI (アメリカ)：飲料水・環境・食品・微生物・製薬
- ・PTP (フランス)：非鉄関連・航空宇宙関連試験
- ・TESTVERITAS (フランス)：食品・食肉・野菜



YouTubeチャンネル [西進商事公式]

弊社取り扱い製品の情報を公開中です。(順次アップロード予定)



**SEISHIN**

標準物質専門商社

**西進商事株式会社**

<https://www.seishin-syoji.co.jp/>

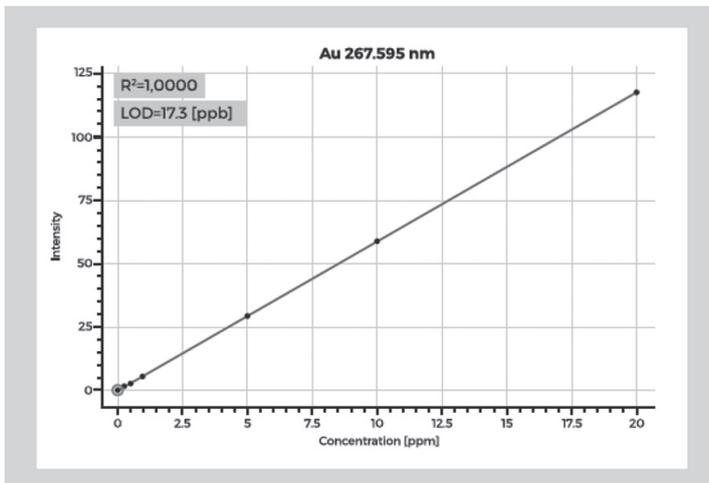
本社 〒650-0047 神戸市中央区港島南町1丁目4番地4号  
TEL.(078)303-3810 FAX.(078)303-3822  
東京支店 〒105-0012 東京都港区芝大門2丁目12番地7号 (RBM芝パークビル)  
TEL.(03)3459-7491 FAX.(03)3459-7499  
名古屋営業所 〒450-0002 名古屋市中村区名駅4丁目2番25号 (名古屋ビルディング桜館4階)  
TEL.(052)586-4741 FAX.(052)586-4796  
北海道営業所 〒060-0002 札幌市中央区北二条西1丁目10番地 (ピア2・1ビル)  
TEL.(011)221-2171 FAX.(011)221-2010

# 窒素ガスICP分析計 MICAP™-OES 1000

RADOM™



独自開発の高周波技術CERAWAVE™が可能にした窒素ガスベースのICP発光装置です。小型で高性能なMICAP-OES-1000は、独立したプラズマソースと光ファイバー接続のエシエル型分光光度計から構成されます。小型、軽量なこのシステムはユーザーに大幅なランニングコストの低減をもたらします。



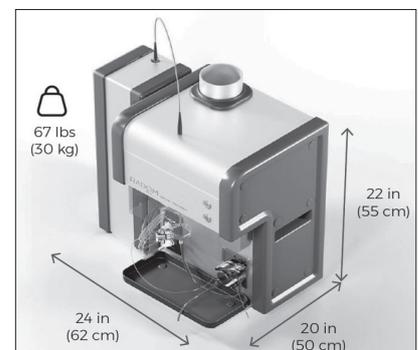
金の検量線 (0.025~20.00ppm)

## 特徴

- 窒素ガスプラズマ方式 (Arガス不要)
- 新開発プラズマソースCERAWAVE™ (1000W)
- 空冷式トーチ
- エシエル分光器による全波長同時測定
- 省スペース設計

Aperture:	f/10
Wavelength range:	194 nm - 625 nm
Simultaneous:	up to 625 nm
Slit Width:	30 μm slit
Resolution:	5pm - 30 pm

光ファイバー接続のエシエル分光検出器



装置寸法・重量

輸入総販売元

株式会社 エス・ティ・ジャパン

<http://www.stjapan.co.jp>

東京本社 /

〒103-0014 東京都中央区日本橋蛸殻町1-14-10

TEL: 03-3666-2561 FAX: 03-3666-2658

大阪支店 /

〒573-0094 大阪府枚方市南中振1-16-27

TEL: 072-835-1881 FAX: 072-835-1880

ST.JAPAN INC.

マイクロプラスチック分析用  
**熱分解GC/MSシステム**



フロンティア・ラボのマイクロプラスチック分析用熱分解GC/MSシステムは ASTM D8401-24 「熱分解GC/MSを用いた水中のマイクロプラスチックの標準試験法\*」に準拠しています。

\*Standard Test Method for Identification of Polymer Type and Quantity of Microplastic Particles and Fibers in Waters with High to Low Suspended Solids Using Pyrolysis - Gas Chromatography/Mass Spectrometry



システム紹介

*Advance your microplastics research with Frontier Lab's system*

迅速凍結粉碎装置 **IQ MILL-2070**

**簡単操作！扱いやすい卓上型の粉碎装置**

- 静かな作動音 … 通常会話を妨げないレベル（粉碎時の騒音参考値55 dB）
- 瞬時 & パワフルに粉碎 … 高速上下ねじれ運動による効率的な粉碎
- 試料に合わせた細かな条件設定 … 粉碎速度/時間/サイクル数の設定種類豊富な粉碎子と容器
- 液体窒素消費量が少なく省エネ … 液体窒素の最小消費量は約300 mL

静音設計



製品情報



マススペクトル  
検索ソフトウェア **F-Search 3.8**

**ポリマー・添加剤を瞬時に同定！**

- ライブラリー登録数大幅増 … 前バージョン比約650種類のポリマーを追加

NEW



製品情報



**フロンティア・ラボ フォーラム 2024を開催します**

講師の先生方によるマイクロプラスチック分析や反応熱分解分析などのご講演のほか、最新の分析手法のご紹介、協力企業様と弊社による製品展示とポスター講演を行います。

- 開催日時：2024年11月19日(火) 9:30～16:30頃
- 開催場所：浅草橋ヒューリックホール

詳細は弊社ウェブサイトへ



**フロンティア・ラボ 株式会社** [www.frontier-lab.com/jp](http://www.frontier-lab.com/jp) [info@frontier-lab.com](mailto:info@frontier-lab.com)

高性能の熱分解装置と金属キャピラリーカラムの開発・製品化に専念して、洗練された製品をお届けしています

# ポリマー分析用試料キット

## ポリマーサンプルキット205

<1セット 100本入・10-20g/1本>

100本の構成ポリマーは汎用性ポリマー試料だけでなくエンブラ試料も含まれておりますのでIR分析等のライブラリーへの収録にご利用いただけるポリマー分析試料キットです。

スペックとして：引火点・平均分子量・屈折率・ガラス転移点・融解温度等の情報がございます。

100種類の試料の一部試料については入れ替えも可能です。

詳しくはお問い合わせ下さい。



Cap No.	Cat No.	Polymer	Cap No.	Cat No.	Polymer
1	053	Acrylonitrile/butadiene copolymer - 22% acrylonitrile	51	107	Polyethylene, chlorosulfonated
2	054	Acrylonitrile/butadiene copolymer - 22% acrylonitrile	52	042	Polyethylene, low density
3	530	Acrylonitrile/butadiene copolymer - 51% acrylonitrile	53	405	Polyethylene, oxidized
4	209	Butyl methacrylate/isobutyl methacrylate copolymer	54	491	Poly(ethylene glycol)
5	660	Cellulose	55	136A	Poly(ethylene oxide) - Approx Mw 100,000
6	083	Cellulose acetate	56	136E	Poly(ethylene oxide) - Approx Mw 400,000
7	077	Cellulose acetate butyrate	57	113	Poly(ethyl methacrylate)
8	321	Cellulose propionate	58	414	Poly(2-hydroxyethyl methacrylate) - Approx Mw 300,000
9	1078	Cellulose triacetate	59	815	Poly(2-hydroxyethyl methacrylate) - Approx Mw 1,000,000
10	459	Ethyl cellulose - Viscosity 4cp (5% solution @ 25°C)	60	112	Poly(isobutyl methacrylate)
11	464	Ethyl cellulose - Viscosity 22cp (5% solution @ 25°C)	61	106	Polyisoprene, chlorinated
12	460	Ethyl cellulose - Viscosity 300cp (5% solution @ 25°C)	62	037B	Poly(methyl methacrylate) - Approx Mw 75,000
13	534	Ethylene/acrylic acid copolymer - 15% acrylic acid	63	037D	Poly(methyl methacrylate) - Approx Mw 540,000
14	455	Ethylene/ethyl acrylate copolymer - 18% ethyl acrylate	64	382	Poly(4-methyl-1-pentene)
15	939	Ethylene/methacrylic acid copolymer - 12% methacrylic acid	65	391	Poly(p-phenylene ether-sulphone)
16	243	Ethylene/vinyl acetate copolymer - 14% vinyl acetate	66	090	Poly(phenylene sulfide)
17	244	Ethylene/vinyl acetate copolymer - 18% vinyl acetate	67	130	Polypropylene, isotactic
18	316	Ethylene/vinyl acetate copolymer - 28% vinyl acetate	68	1024	Polystyrene, Mw 1,200
19	246	Ethylene/vinyl acetate copolymer - 33% vinyl acetate	69	039A	Polystyrene - Approx Mw 260,000
20	326	Ethylene/vinyl acetate copolymer - 40% vinyl acetate	70	574	Polystyrene sulfonated, sodium salt
21	784	Ethylene/vinyl acetate copolymer - 45% vinyl acetate	71	046	Polysulfone
22	959	Ethylene/vinyl alcohol copolymer - 38% ethylene	72	203	Poly(tetrafluorobutylene)
23	143	Hydroxyethyl cellulose	73	166	Poly(2,4,6-tribromostyrene)
24	401	Hydroxypropyl cellulose	74	347	Poly(vinyl acetate) - Approx Mw 150,000
25	423	Hydroxypropyl methyl cellulose - 10% hydroxypropyl, 30% methoxyl	75	1040	Poly(vinyl acetate) - Approx Mw 500,000
26	144	Methyl cellulose	76	336	Poly(vinyl alcohol), 88% hydrolyzed
27	374	Methyl vinyl ether/maleic acid copolymer - 50/50 copolymer	77	352	Poly(vinyl alcohol), 98% hydrolyzed
28	317	Methyl vinyl ether/maleic anhydride - 50/50 copolymer	78	361	Poly(vinyl alcohol), 99% hydrolyzed
29	034	Nylon 6 Poly(caprolactam)	79	043	Poly(vinyl butyral)
30	033	Nylon 6/6 Poly(hexamethylene adipamide)	80	038	Poly(vinyl chloride)
31	313	Nylon 6/12 Poly(hexamethylene dodecanediamide)	81	353	Poly(vinyl chloride), carboxylated - 1.8% carboxyl
32	006	Nylon 11 Poly(undecanoamide)	82	102	Poly(vinylidene fluoride)
33	044	Nylon 12 [Poly(lauryllactam)]	83	840	Poly(4-vinylpyridine), linear
34	045A	Phenoxy resin	84	416	Poly(4-vinylpyridine-co-styrene)
35	009	Polyacetal	85	132	Polyvinylpyrrolidone - Approx Mw 360,000
36	001	Polyacrylamide	86	494	Styrene/acrylonitrile copolymer - 25% acrylonitrile
37	1036	Polyacrylamide, carboxyl modified, high carboxyl content	87	495	Styrene/acrylonitrile copolymer - 32% acrylonitrile
38	026	Poly(acrylic acid) - Approx Mw 450,000	88	393	Styrene/allyl alcohol copolymer
39	599	Poly(acrylic acid) - Approx Mw 4,000,000	89	057	Styrene/butadiene copolymer, ABA block
40	134	Polyacrylonitrile	90	595	Styrene/butyl methacrylate copolymer
41	385	Polyamide resin	91	453	Styrene/ethylene-butylene copolymer, ABA block
42	128	Poly(1-butene), isotactic	92	1067	Styrene/isoprene copolymer, ABA block
43	962	Poly(butylene terephthalate)	93	457	Styrene/maleic anhydride copolymer
44	111	Poly(n-butyl methacrylate)	94	049	Styrene/maleic anhydride copolymer - 50/50 copolymer
45	1029	Polycaprolactone	95	068	Vinyl chloride/vinyl acetate copolymer - 10% vinyl acetate
46	954	Polycarbonate - Approx Mw 36,000	96	063	Vinyl chloride/vinyl acetate copolymer - 12% vinyl acetate
47	035	Polycarbonate - Approx Mw 45,000	97	911	Vinyl chloride/vinyl acetate/hydroxypropyl acrylate - 80% vinyl chloride, 5% vinyl acetate
48	126	Poly(2,6-dimethyl-p-phenylene oxide)	98	058	Vinylidene chloride/vinyl chloride copolymer - 5% vinylidene chloride
49	324	Poly(4,4'-dipropoxy-2,2'-diphenyl propane fumarate)	99	369	n-Vinylpyrrolidone/vinyl acetate copolymer - 60/40 copolymer
50	558	Polyethylene	100	021	Zein, purified

ここに記されている他にも数千種類のポリマー試料を取り揃えております。 カタログ・資料ご希望およびお問い合わせ等は下記へご連絡下さい。

**GSC** 株式会社 ゼネラル サイエンス コーポレーション

〒170-0005 東京都豊島区南大塚3丁目11番地8号 TEL.03-5927-8356 (代) FAX.03-5927-8357

ホームページアドレス <http://www.shibayama.co.jp> e-mail アドレス [gsc@shibayama.co.jp](mailto:gsc@shibayama.co.jp)

# 分析業界のコストカッター ディスポチューブでらくらく粉砕!!

立体8の字<sup>®</sup>原理による **秒速粉砕機**

商標登録第 6576850 号

## マルチビーズショッカー<sup>®</sup> Multi-beads Shocker<sup>®</sup>



MB3000シリーズ

☑️ 卓上型・省スペース ☒ 極静音

豊富な種類の粉砕用ディスポ容器

96well ~ 最大 100ml チューブまでラインナップ!!

粉砕チューブ一例



各サンプル量に合わせた最適粉砕を実現!  
タングステンカーバイド、チタン、メノウ、酸化ジルコニウム、  
PTFEなど豊富なラインナップ!

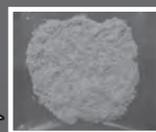
**更新キャンペーン実施中!**

※詳しくは、お問合せ下さい。

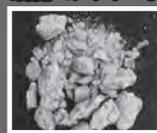
フィルムコーティング錠剤 20粒



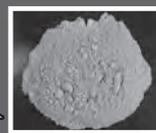
粉砕時間  
**30秒**  
常温



硬化コンクリート



粉砕時間  
**60秒**  
常温



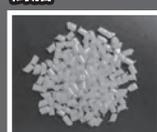
ゴム



粉砕時間  
**10秒**  
液体窒素  
条件下



樹脂



粉砕時間  
**10秒**  
液体窒素  
条件下



ヨーロッパ安全基準適合



テスト粉砕 と デモ は、  
アプリケーションラボで **無料** で実施しています。  
遠慮なくお問合せ下さい!



お陰様で2023年に創業70周年を迎えました。

製造発売元 **安井器械株式会社** 本社・工場 〒534-0027 大阪市都島区中野町2-2-8

TEL.06-4801-4831 FAX.06-6353-0217  
E-mail:s@yasuikikai.co.jp https://www.yasuikikai.co.jp

©2024 Yasui Kikai Corporation, all rights reserved.

240613

# BAS

## 光学式酸素モニター



FireSting O2-C 酸素モニター(4ch)

接続するセンサータイプを入れ替えることで、基本機能の光学式酸素モニタリング測定の外に光学式温度測定、および(一部機種のみ)pH測定が可能な測定装置です。

- 一台で最大4チャンネル対応。項目の組合せは自由
- 気相および液相での測定に利用できます
- 酸素濃度測定用のセンサーには通常用と低濃度用があります
- 非接触型など様々なタイプのセンサーをラインナップ

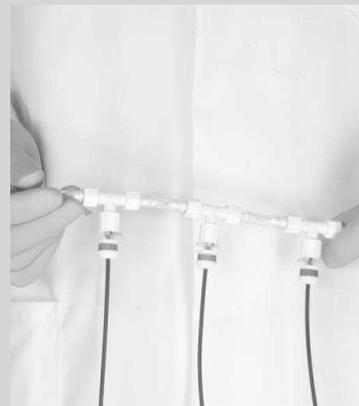
ミニプローブを  
溶液に挿して...



密閉容器内の酸素濃度や  
温度の測定に...



フローセルタイプで  
流体の測定に...

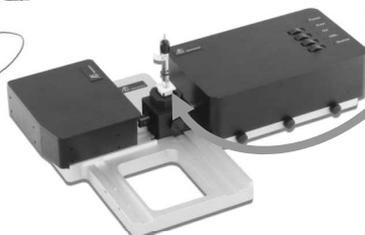


# BAS

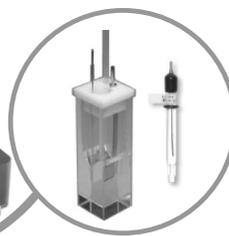
## 分光電気化学システム



モデル3325  
バイポテンシostat



SEC2020  
スペクトロメーターシステム



SEC-CT  
石英ガラス製光電気化学  
セルキット+参照電極

電気化学的な挙動と分光スペクトル変化を同時に測定できるシステムです。

● 製品の的外観、仕様は改良のため予告なく変更される場合があります。

BAS ビー・イー・エス株式会社

光学式センサーをはじめ各種のアクセサリーについては  
弊社ホームページでご確認下さい!!

本社 〒131-0033 東京都墨田区向島 1-28-12  
東京営業所 TEL: 03-3624-0331 FAX: 03-3624-3387  
大阪営業所 TEL: 06-6308-1867 FAX: 06-6308-6890

セミナー講演内容などビー・イー・エス株式会社の最新情報はメールニュースで随時配信しております。配信ご希望の方はお気軽にお問合せ下さい ⇒ E-mail: sp2@bas.co.jp

## 【ア行】

(株)エス・ティ・ジャパン…………… A1

## 【サ行】

(株)島津製作所…………… 表紙 3

サーモフィッシャー

サイエンティフィック(株)…………… A5

西進商事(株)…………… カレンダー裏

(株)ゼネラルサイエンス

コーポレーション…………… A3

## 【ナ行】

日本電気計器検定所…………… 表紙 4

日本分光(株)…………… 表紙 2

## 【ハ行】

ビー・エー・エス(株)…………… A8

フロンティア・ラボ(株)…………… A2

## 【ヤ行】

安井器械(株)…………… A4

製品紹介ガイド…………… A6~7

**Thermo Fisher**  
SCIENTIFIC

## Thermo Scientific™ Nalgene™ クリーンボトルサービス

ボトルの洗浄前後の残存パーティクルやメタル成分を比較したアプリケーションノートを公開中!

### 特長

- 洗浄証明書の発行が可能

### こんな方におすすめ

- ボトル内部のパーティクル数をコントロールしたい方
- 洗浄コストや人的リソースを見直したい方



■ 詳細はこちらをご覧ください [thermofisher.com/jp-cleanbottle-online-seminar](https://thermofisher.com/jp-cleanbottle-online-seminar)

研究用のみ使用できます。診断用には使用いただけません。これらの製品は一般的なラボでの使用を目的としています。製品の性能がお客様の用途やアプリケーションに適しているかどうかはお客様自身でご確認ください。

© 2024 Thermo Fisher Scientific Inc. All rights reserved. All trademarks are the property of Thermo Fisher Scientific and its subsidiaries unless otherwise specified. 実際の価格は、弊社販売代理店までお問い合わせください。価格、製品の仕様、外観、記載内容は予告なしに変更する場合がありますのであらかじめご了承ください。標準販売条件はこちらをご覧ください。 [thermofisher.com/jp-tc](https://thermofisher.com/jp-tc) LSP501-A24100B

サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社

thermo scientific

お問い合わせはこちら [thermofisher.com/contact](https://thermofisher.com/contact)

## デジタルラボラトリーにおける化学分析の実践と展望

小林 成, 一杉 太郎

### 1 はじめに

すでに一部の化学研究では、機械学習とロボットを活用した自動・自律的な実験が活躍している<sup>1)2)</sup>。機械学習により次の実験が計画され、ロボットが自動的に実験を行う。そして、実験結果をもとに機械学習が次の実験条件を判断する。自動・自律実験におけるこのサイクル(図1)をクローズドループと呼ぶ。さらに、実験過程で合成・分析装置から生成される膨大なデジタルデータは一括してデータストレージに集約され、総合的な解析や研究計画立案に利活用される。このような研究システム(デジタルラボラトリー)の実現は、研究の質を転換し、研究者の働き方自体の変化につながる。そして研究者は、人間にしかできない「より創造的な研究」に挑戦する機会が増える。本稿では、デジタルラボラトリーの世界的潮流と最新の取り組みを紹介する。そして、デジタルラボラトリーにおける化学分析に期待される役割について議論したい。

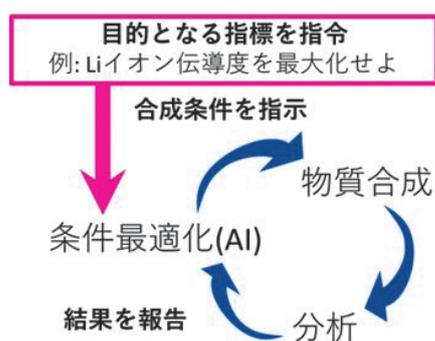


図1 自律実験のワークフロー

### 2 デジタルラボラトリーによる実験革新

本節では、近年進展の著しい自動・自律実験を活用した研究事例を紹介し、その勘所を議論する。

#### 2.1 背景

自動・自律実験の現状を簡単にレビューする。実験化学ではまず、目的を満たす物質の候補を挙げる(推定)、そして実際にその物質を合成し、得られた(もしくは合

成過程の)物質を分析する。これらを繰り返すことにより、新たな科学的知見を獲得する。この推定・合成・分析のループをいかに速く回すかが物質探索のスピードを決める。合成・分析装置制御の精緻化や、社会に求められる物性の高度化・複雑化により、実験すべきパラメータ空間は拡大する一方であり、物質探索の加速が課題になっている。

このような探索範囲の急速な拡大に対して、マテリアルズインフォマティクスを活用した新物質の推定が積極的に進められている。データやシミュレーションによって、有望な物性が期待される物質組成や構造が提案される。そして、合成・評価を自動・自律実験が担うことも実現している。

#### 2.2 自動搬送ロボットを使った汎用実験室の活用

Cooper (Univ. Liverpool) らのグループは、自律搬送ロボット (autonomous mobile robot, AMR) を活用して、汎用の実験室で自動・自律実験を実現した<sup>3)</sup>。液体・固体秤量<sup>ひょうりょう</sup>、加振混合、光触媒反応、ガスクロマトグラフィーなど、自動制御された実験機器を実験台に並べ、バイアル瓶に入れた試料をAMRが運搬する。このシステムを用いて、光触媒活性の向上に向けた添加剤の種類や配合比の最適条件探索を行った。ベイズ最適化と自動実験を繰り返し、8日間のうちに688回の実験を完了させ、初期と比べて6倍高い光触媒活性を示す物質を発見した。このシステムでは、人間が手作業で行う操作をそのままロボットへ置き換えることが可能であり、複数の実験器具を操ることができる。加えて粉体実験ロボットの開発により、デジタルラボラトリーの統合高度化を進めている<sup>4)</sup>。

#### 2.3 理論計算との融合

Ceder (UC Berkeley) らのグループは、自動・自律実験に第一原理計算を組み合わせたシステムを構築した<sup>5)</sup>。粉体秤量、反応焼結、粉末X線回折測定などの自動化に、第一原理計算データベースや学術論文に基づいた自動合成レシピ生成技術を組み合わせている。得られた粉末X線回折パターンを自動解析し、合成レシピのアップデートを自動的に行う仕組みを構築した。さらに合成可能性(大気中での反応性や相安定性)や合成経路

を予測し、新しい研究の進め方を実証することに成功している<sup>6)</sup>。

#### 2.4 クラウドを介した分散型自動・自律実験

新物質を発見するためには、物質合成・特性評価・機能設計・デバイス化など、階層的で複雑な実験が必要である。しかし、一つの研究グループでこれらを完結させるのは困難である。Aspuru-Guzik (Univ. Toronto) らの研究グループは、地理的に分散した複数の研究グループが協働的に研究を推進するためのクラウドハブを構築した<sup>7)</sup>。それにより、各研究グループが得意とする技術をつなぎ、AI 駆動の分子探索と意思決定、自動実験装置による物質合成、デバイス特性評価のループを回すことを可能にした。有望な有機発光分子を 21 種発見し、そのうち三つの分子を用いた薄膜デバイスが、非常に高い発光特性を示すことを報告している。

#### 2.5 自動・自律実験の勘所

これまで紹介した事例を俯瞰すると、デジタルラボラトリーの実践において共通するキーポイントがいくつか見いだされる。ここでは三つ紹介する。

自動化において最も重要なことは、ロボットで実験操作をいかに実現するか、ハードウェアの工夫である（一つ目）。人が使用する実験器具は、ロボットの使用に対して最適化されていない。したがって、ロボットの先端に取り付ける治具（ロボットハンド、またはエンドエフェクタ）の形状に工夫の余地が多くある。この形状次第で自動実験装置のスループットやコストは大きく変化する。

Cooper らの論文においては、特に試料（バイアル瓶）を置くホルダや合成・分析装置への導入において、ロボットハンドの一種であるグリッパ（物体を掴むための治具）へ施した工夫を強調している。Ceder らの論文では、異なる形状のロボットハンドを装着したロボットを複数台配置し、多種の実験器具に対応している。いずれのケースも、試料を保持/運搬するための容器や合成・分析する装置、またそれらを操作するためにロボット側で対応するという発想である。研究目的を達成するために必須の仕様とそうでないものを切り分け、ロボット自体でどこまで対応できるのか（動作の機能性や、位置精度・くりかえし安定性・応答速度など）を把握した上で、デザインが望ましい。今後、合成装置、分析機器や試料ホルダが、「ロボットフレンドリー」になっていくだろう。最初からロボットが操作することを前提とした実験装置の設計である。「人間が使う」ことを前提に装置設計してきた概念が変わる。

システム構築においては、実験装置のモジュール化が重要である（二つ目）。それによりユーザーはモジュールを自在に組み合わせて自動・自律実験システムを構築

することが可能となる。実験の拡張性・フレキシビリティを確保するために、モジュール化は必須である。また、コストダウンにもつながる。

また、ソフトウェアのデバッグという観点でもモジュール化は重要である。実験装置は理化学機器メーカーごとに異なる仕様をもっている。これを一つのプログラムから統合して制御するシステムでは、デバッグの難度が格段に高くなってしまふ。問題がハードウェアに起きていた場合、自動動作によってその悪影響が伝搬し、正常動作していたはずの他の機器にまで影響が及ぶ可能性がある。筆者らの経験した事例では、試料の所在を管理するソフトウェアにバグがあり、試料が実際に存在するのに、「空」として認識されていた。したがって、ソフトウェア上では新しい試料を配置可能であるため、ロボットが搬送動作をしてしまい、試料同士が衝突した。これによりハードウェア故障が起きた。

モジュール化において、全体システム設計を階層に分け、実験装置ごとに独立して動作するシステムアーキテクチャにすることが肝要である。全体を統括する制御コンピュータから各モジュールへ指令を出す際に、最小限の命令を通信するだけにする。つまり、各装置が「疎な結合」でつながったアーキテクチャとする。

筆者らは、制御コンピュータと各モジュール間の通信プロトコル（通信するための取り決め）を公開している。Ceder らの論文にも、モジュール化を意識した各装置との通信についてアーキテクチャが記載されている。この仕組みは、ハードウェア制御の面だけでなくサイバーセキュリティの観点からも恩恵が得られる。インターネットに接続する必要のない合成・分析装置をネットワークから分離して保護することができる。

そして最後に強調したいことは、自動・自律実験の効用を最大化するためには計算シミュレーション技術の活用が重要であるという点である（三つ目）。自動・自律化によって実験回数が増加しても、化学空間は広大であるので、物質組成や合成条件の全探索は不可能といってよい<sup>8)</sup>。そこで Ceder や Aspuru-Guzik らの研究例にある通り、候補物質の絞り込みや合成原料の推定などに、第一原理計算や機械学習の活用が必要になる<sup>9)</sup>。

### 3 デジタルラボラトリーにおける自動化学分析の可能性

これまでの研究事例に示したように、デジタルラボラトリーの主な強みは、①自動化・並列化による実験回数の飛躍的な増加、②合成プロセス・分析データのデジタル化によるデータ生成とその利活用、③装置・データのシェアリングと高い再現性にある。

デジタルラボラトリーの高度化に向けた現状の課題について、特に筆者らが実際にデジタルラボラトリーを構築している際に直面した課題を述べる。そして新しい化

学分析の可能性について議論する。

### 3.1 多角的分析による科学的発見の加速

筆者らの研究グループは、前述したモジュール開発のコンセプトを適用して、固体薄膜物質のデジタルラボラトリーを構築した(図2)<sup>10)</sup>。スパッタリング法を用いた“薄膜合成モジュール”，複数の“分析モジュール”をロボット搬送システムが接続している。ソフトウェアもモジュール化して、モジュールと制御コンピュータ間の通信プロトコルを共通化し、Plug and Playで接続することを可能にした。実際に理化学機器メーカー5社に対して、通信プロトコルや試料形状を開示し、装置を開発していただいた。それを実験室でシステム化した。

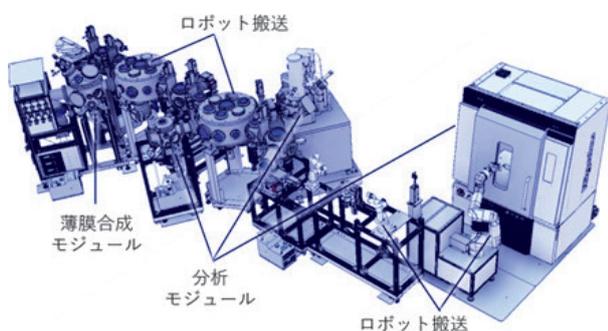


図2 薄膜物質探索のデジタルラボラトリー

複数の搬送ロボットから、接続された合成・分析モジュールにアクセスする仕組みになっている

この自動・自律薄膜物質探索システムでは、合成した物質の構造や組成、電子物性を自動的に評価することができる。複数の分析装置を物理的に接続し、かつ、それぞれの分析が自動化しており、同一試料に対して短時間で多角的な分析を進めることができる。

これにより、研究目的外の物性も網羅的にデータを得ることができる。化学研究における現在の課題は、研究者が興味ある物性のみ分析・計測されており、欠損したデータが多いということである。既知の“古い”物質が、実はこのような特性を有していると“再発見”される事例は数多く存在する。

この網羅的にデータを得るという点で、筆者らも、自動・自律実験の過程で目的外の物質発見を経験している。新規のLiイオン伝導体を探索する過程で電池電極材料を見いだした<sup>11)</sup>。イオン伝導体探索の自動・自律実験では、作製した薄膜それぞれに対して電気化学インピーダンス測定を行い、イオン伝導特性を評価する。実際に、合成温度とスパッタリング出力(元素組成に対応)の最適条件を探索すると、いくつかの高伝導度領域が現れる(図3)。しかし、一部の領域では、Liイオン伝導抵抗のみでは解釈が出来ないスペクトルを示す試料

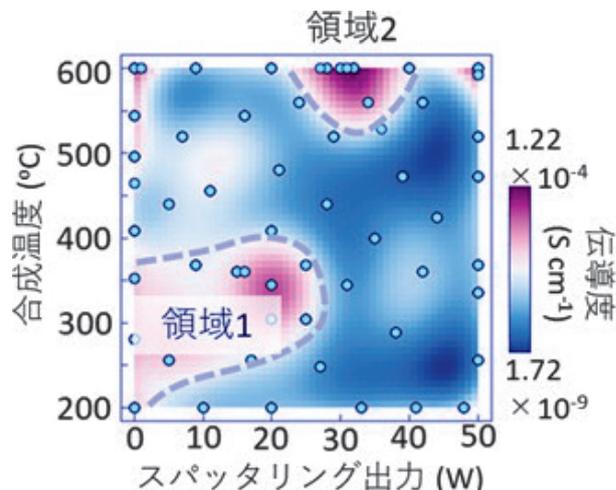


図3 自律実験による物質探索の例

作製した薄膜試料の電気伝導度を指標に、二つの合成条件の同時最適化を行った。バックグラウンドのうちに、二つの高伝導度領域が表れている。[American Chemical Societyの許諾を得て一部改変の上転載]。

が存在しており、これは電子伝導の寄与を反映していると考えられた。そこで混合伝導体であることを期待して、電池電極としての充放電特性を評価すると電池反応が観察された。つまり、Liイオン伝導体を探索していたところ、思いがけず電池電極材料を見いだした。今後、磁性や誘電特性評価等のモジュールを追加して研究を進めると、電池材料を狙っていたのに高性能磁石ができた、というような発見が起きるだろう。このように、多角的な自動分析によって、今まで見過ごされてきた物質・材料の再発見が加速することが期待される。

### 3.2 データフォーマット標準化による統合的分析

多くの化学分析装置では、装置メーカーそれぞれに固有のデータフォーマットでファイルが出力される。そのままでは研究者自身が自由に解析することが難しいため、測定データをテキスト形式へ手動で変換し、ネットワーク経由やUSBメモリーなど物理的な手段で測定PCから自分のPCに移動させる。したがって、各分析装置から統一したフォーマットで出力し、クラウド上にアップロードすることが強く望まれる。

デジタルラボラトリーでは、データフォーマットを共通化し、集めた合成・分析データを統合して解析することが可能である。具体的には、2024年5月にJIS規格として登録されたMaiML (Measurement, Analysis, Instrument Markup Language) 形式<sup>12)</sup>で分析装置からデータ出力される。そのデータはAWSにアップロードされ、そのクラウド上でデータ解析することを実現した。このMaiML形式はテキスト形式(XML)で直接に閲覧可能なデータが出力される。ブラウザ上でデータ解析可能な統合ソフトウェアは、ベンチャー企業を含め

様々な企業から提供されている<sup>13)</sup>。

実際に自動・自律実験装置を運用してみると、出力される実験データの量は膨大であり、人手での解析はとても難しいことを実感した。研究者は得られた実験データのほんの一部を掘り下げて解析するが、多くは未活用のまま残される。計測だけでなく解析も適切に自動化していくことが必須となる。たとえば、筆者らはXRDパターンの自動解析をしており、今後、分析装置は正確に計測しデータを単に出力するだけではなく、その解釈をも提案することが望まれる。

### 3.3 大規模言語モデルの活用

近年進展が著しい大規模言語モデル (LLM) を物質・材料研究に応用する試みはすでに始まっている。例えば、文献情報から適切な合成条件を抽出することが実演されている。それにより少ない実験回数で最適化が完了することが期待される。多くの自律実験において、ベイズ最適化など、条件最適化アルゴリズムを用いる。このとき、最適化する条件パラメータ (温度、酸素分圧等) を人間が指定する。LLMをも活用した最適化では、既報の合成反応も含めて推定するため、実験条件にあたりをつけた上で実験を進めることが可能になる。また、最近では観察された現象の解釈を自動的に行うことが報告されている<sup>14)</sup>。このようなLLMの自動・自律実験システムへの活用が今後増えてくるだろう。人とインタラクティブに自動・自律探索を進める将来が期待できる。

## 4 おわりに

本稿では、デジタルラボラトリーの構築とそれを用いた最新の化学研究について紹介した。物質科学へ機械学習やロボット技術を導入することにより、新しい化学の進展が期待される。特徴量となる物性値・物理量を適切に、また正確に計測することが、データ活用の鍵である。正確に、自動的という観点で化学分析の果たす役割は大きい。化学分析装置がロボットフレンドリーになる設計、装置間をつなぐ設計、標準化、外部からの制御を可能とするなど、取り組むべきことは多い。さらに、今後、試料に合わせた測定条件の自動的な決定や解析が発展することが期待される。そしてこのような化学分析の自動化・自律化は、研究者のあり方を変えるであろう。2024年のノーベル物理学賞と化学賞はそれを予見していると言える。

### 文 献

- 1) 一杉太郎編：“マテリアル×機械学習×ロボット (現代化学増刊 48)”, (東京化学同人), (2024)。
- 2) 日本化学会編：“化学における情報・AIの活用：解析と合成を駆動する情報科学 (CSJ カレントレビュー: 50)”, (化学同人), (2024)。

- 3) B. Burger, P. M. Maffettone, V. V. Gusev, C. M. Aitchison, Y. Bai X. Wang, X. Li, B. M. Alston, B. Li, R. Clowes, N. Rankin, B. Harris, R. S. Sprick, A. I. Cooper : *Nature*, **583**, 237 (2020).
- 4) A. M. Lunt, H. Fakhruddin, G. Pizzuto, L. Longley, A. White, N. Rankin, R. Clowes, B. Alston, L. Gigli, G. M. Day, A. I. Cooper, S. Y. Chong : *Chem. Sci.*, **15**, 2456 (2024).
- 5) N. J. Szymanski, B. Rendy, Y. Fei, R. E. Kumar, T. He, D. Milsted, M. J. McDermott, E. D. Cubuk, A. Merchant, H. Kim, A. Jain, C. J. Bartel, K. Persson, Y. Zeng, G. Ceder : *Nature*, **624**, 86 (2023).
- 6) N. J. Szymanski, Y. Byeon, Y. Sun, Y. Zeng, J. Bai, M. Kunz, D. Kim, B. A. Helms, C. Bartel, H. Lim, G. Ceder : *Sci. Adv.*, **10**, eadp3309 (2024).
- 7) F. Strieth-Kalthoff, H. Hao, V. Rathore, J. Derasp, T. Gaudin, N. H. Angello, M. Seifrid, E. Trushina, M. Guy, J. Liu, X. Tang, M. Mamada, W. Wang, T. Tsagaantsooj, C. Lavigne, R. Pollice, T. C. Wu, K. Hotta, L. Bodo, S. Li, M. Haddadnia, A. Wolos, R. Roszak, C. T. Ser, C. Bozal-ginesta, R. J. Hickman, J. Vestfraid, A. Aguilar-granda, E. K. Klimareva, R. C. Sigerson, W. Hou, D. Gahler, S. Lach, A. Warzybok, O. Borodin, S. Rohrbach, B. Sanchez-lengeling, C. Adachi, B. A. Grzybowski, L. Cronin, J. E. Hein, M. D. Burke, A. Aspuru-Guzik : *Science*, **384**, 756 (2024).
- 8) P. Kirkpatrick, C. Ellis : *Nature*, **432**, 823 (2004).
- 9) N. J. Szymanski, P. Nevatia, C. J. Bartel, Y. Zeng, G. Ceder : *Nat. Comm.*, **14**, 6956 (2023).
- 10) R. Shimizu, S. Kobayashi, Y. Watanabe, Y. Ando, T. Hitosugi : *APL Mater.*, **8**, 111110 (2020).
- 11) S. Kobayashi, R. Shimizu, Y. Ando, T. Hitosugi : *ACS Mat. Lett.*, **5**, 2711 (2023).
- 12) 一村信吾, 重藤知夫, 安永卓生, 井上信介 : 応用物理, **92**, 142 (2023).
- 13) 三井情報株式会社, 最適化アプリケーション試作版, <<https://www.mki.co.jp/solution/mi.html>>, (accessed 2024, 9, 10).
- 14) J. Dagdelen, A. Dunn, S. Lee, N. Walker, A. S. Rosen, G. Ceder, K. A. Persson, A. Jain : *Nat. Comm.*, **15**, 1418 (2024) ; K. Hatakeyama-Sato, H. Ishikawa, S. Takaiishi, Y. Igarashi, Y. Nabae, T. Hayakawa : *Polym. J.*, (2024) ; S. Kim, Y. Jung, J. Schrier : *J. Am. Chem. Soc.*, **146**, 19654 (2024). など



小林 成 (Kobayashi Shigeru)

東京大学大学院理学系研究科化学専攻 (〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1). 東京工業大学物質理工学院博士課程修了。博士 (工学)。《趣味》合気道。  
E-mail : kobayashi-shigeru@g.ecc.u-tokyo.ac.jp



一杉 太郎 (Hirotsugi Taro)

東京大学大学院理学系研究科化学専攻 (〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1). 東京大学工学系研究科博士課程修了。博士 (工学)。《主な著書》“マテリアル・機械学習・ロボット (現代化学増刊 48)”, (東京化学同人)。《趣味》散歩。  
E-mail : hitosugi@g.ecc.u-tokyo.ac.jp