

バイオ・ラマン研究におけるバックグラウンド成分の自動的除去

Automation for Background Subtraction of Bio-Raman Spectra

東北大院薬¹, 東北大院理² ○(M1) 菅原 達郎¹, (M1) 楊啓¹, 中林孝和¹, 盛田伸一²

Tohoku Univ.^{1,2}, °Tatsuro Sugawara¹, Qi Yang¹, Takakazu Nakabayashi¹, and Shin-ichi Morita²

E-mail: shinmorita@m.tohoku.ac.jp

ラマン顕微鏡を用いた生細胞のラマンスペクトルの測定やイメージングを行う研究（バイオ・ラマン研究）は、近年盛んに行われている。バイオ・ラマン研究では、大量の細胞のラマンスペクトルに対して多変量解析を頻繁に行う。その際、測定したラマンスペクトルからバックグラウンド成分を引く操作が必須である。これまではその操作を手動で行っていたため膨大な時間がかかっていた。この研究の目的はバックグラウンド成分を自動的に除去する方法を開発し応用することである[1]。

Fig. 1 に具体例を示す。生細胞内に共焦点を結び計測したラマンスペクトルを $p(w_j)$ とし、石英基板（バックグラウンド）のみのラマンスペクトルを $q(w_j)$ とする（ w_j はラマンシフト）。 $r(w_j) = p(w_j) - kq(w_j)$ によりバックグラウンド成分を排した生細胞のラマンスペクトル $r(w_j)$ を得る。このとき適切な k 値を求める必要がある。我々はスペクトル $r(w_j)$ の端から端までの長さが最小となるときの最適な k 値が得られると考え、

$$k = \frac{\sum_{j=1}^n p'(w_j)q'(w_j)}{\sum_{j=1}^n q'(w_j)q'(w_j)} \quad (j = 1, 2, 3, \dots, n)$$

を導出した。当日は、原理について詳しく説明し、応用例についても紹介する。

[1] T. Sugawara, Q. Yang, T. Nakabayashi, and S. Morita, *Anal. Sci.*, **33**, 1323–1325 (2017).

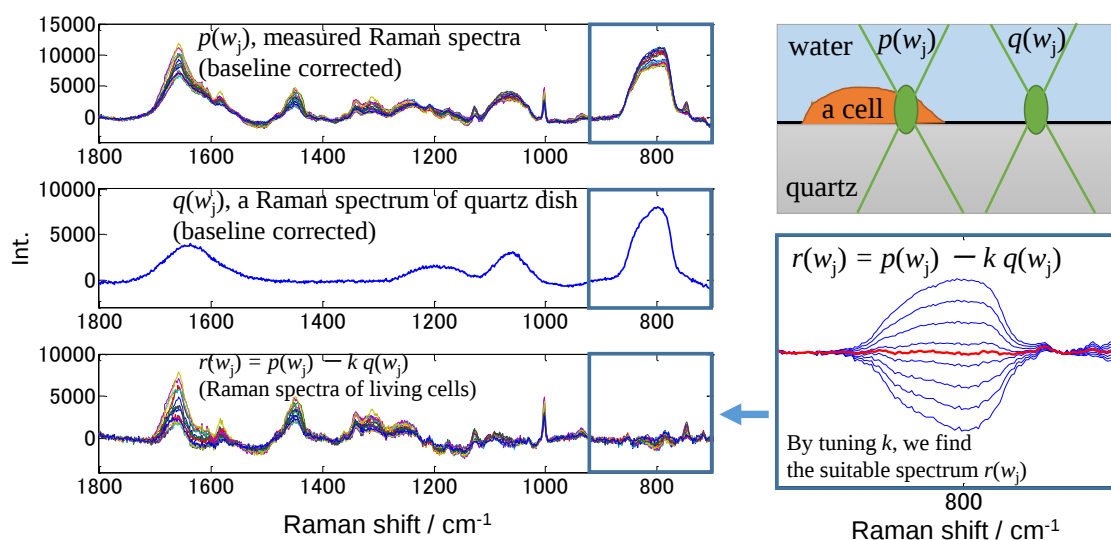


Fig. 1 Observed Raman spectra $p(w_j)$ (baseline corrected), a Raman spectrum of quartz dish $q(w_j)$ (baseline corrected), and the subtracted spectra $r(w_j)$ obtained by $r(w_j) = p(w_j) - kq(w_j)$