

1

2

Q-07 溶液の色の機器測定法

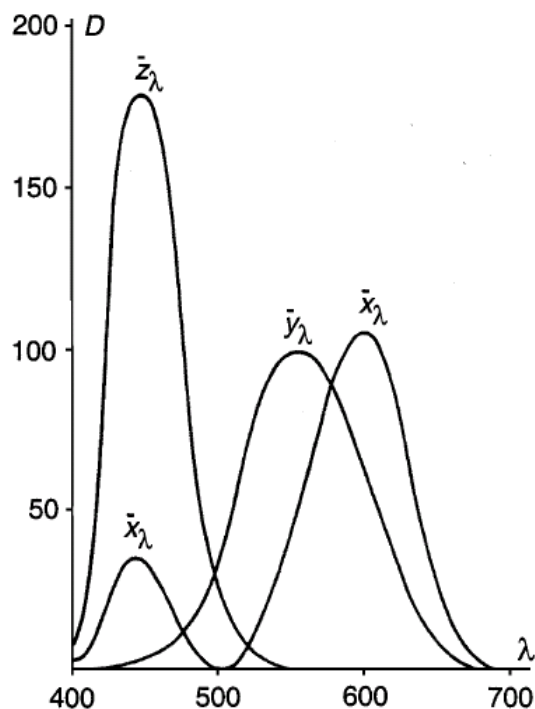
3

4 原理

5 測定される物質の色は第一にその物質の吸収特性に依存する。しかし、光源の違い、
6 光源のスペクトルエネルギー、測定者の視感度、サイズの違い、背景の違い及び見
7 方向性の違いのような種々の条件によっても色の見え方は異なる。色相、明度又は
8 輝度及び彩度は色の三属性とされている。決められた条件のもとで機器測定を行
9 えば色の数値化は可能である。どのような色の機器測定においてもヒトの目が3タイ
10 プの受容体を通して色を見るということに基づいている。

11 色の測定において、目視による色の主観的な観察よりも機器測定法は、より客観的
12 なデータを得ることができる。適切な保守管理及び校正を行うことで機器測定法に
13 より正確で、精度よく、さらに経時的に変化しない一定の色の測定値を得ることが
14 できる。正常な色覚を持つヒト被験者による広範囲なカラーマッチング実験を通し
15 て、分散係数（荷重係数）を可視スペクトル範囲のそれぞれの波長で求めて、その
16 波長の光による各受容体の相対的な刺激量を求めた。

17 国際照明委員会（CIE）は、測色標準観測者が対象（視界）を認識する光源及び光の
18 角度を考慮したモデルを開発した。溶液の色の目視テストにおいては視角 2° の視野
19 及び散乱昼光を用いる必要がある。ヒトの目の平均的な感受性は \bar{x}_λ 、 \bar{y}_λ 及び \bar{z}_λ の分
20 散係数で表される（図1）。



21

22

図1 ヒトの目の平均的な感受性，CIE 視界 2° の測色標準観測者

23

(D：分散係数； λ ：波長 nm)

24

全ての色における各受容体タイプの刺激量は3刺激値（XYZ）によって定義される。

25 分散係数と 3 刺激値 (X , Y 及び Z) の関係は次の積分で表される.

$$26 \quad X = k \int_0^{\infty} f_{\lambda} \bar{x}_{\lambda} S_{\lambda} d\lambda$$

$$27 \quad Y = k \int_0^{\infty} f_{\lambda} \bar{y}_{\lambda} S_{\lambda} d\lambda$$

$$28 \quad Z = k \int_0^{\infty} f_{\lambda} \bar{z}_{\lambda} S_{\lambda} d\lambda$$

$$29 \quad k = 100 / \int_0^{\infty} \bar{y}_{\lambda} S_{\lambda} d\lambda$$

30 k : 1 つの受容体タイプと使用した光源を特徴付ける基準化係数

31 S_{λ} : 光源の相対分光分布

32 \bar{x}_{λ} , \bar{y}_{λ} 及び \bar{z}_{λ} : CIE 視界 2° の測色標準観測者におけるカラーマッチング分散係数

33 f_{λ} : 物質の分光透過率係数

34 λ : 波長 (nm)

35

36 実際の 3 刺激値の計算において, 積分は次式に示すように近似的な和で求める.

$$37 \quad X = k \sum_{\lambda} T_{\lambda} \bar{x}_{\lambda} S_{\lambda} \Delta\lambda$$

$$38 \quad Y = k \sum_{\lambda} T_{\lambda} \bar{y}_{\lambda} S_{\lambda} \Delta\lambda$$

$$39 \quad Z = k \sum_{\lambda} T_{\lambda} \bar{z}_{\lambda} S_{\lambda} \Delta\lambda$$

$$40 \quad k = \frac{100}{\sum_{\lambda} S_{\lambda} \bar{y}_{\lambda} \Delta\lambda}$$

41

42 3 刺激値は CIE の Lab 色空間座標: L^* (明度又は輝度), a^* (赤色-緑色) 及び b^*
43 (黄色-青色) を計算する. これらは次のように定義される.

$$44 \quad L^* = 116 f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) - 16$$

$$45 \quad a^* = 500 \left[f\left(\frac{X}{X_n}\right) - f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) \right]$$

$$46 \quad b^* = 200 \left[f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) - f\left(\frac{Z}{Z_n}\right) \right]$$

47 ここで、

$$48 \quad f\left(\frac{X}{X_n}\right) = \left(\frac{X}{X_n}\right)^{1/3} \quad \frac{X}{X_n} > (6/29)^3 \text{ のとき } f\left(\frac{X}{X_n}\right) = \frac{841}{108}\left(\frac{X}{X_n}\right) + \frac{4}{29};$$

$$49 \quad f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) = \left(\frac{Y}{Y_n}\right)^{1/3} \quad \frac{Y}{Y_n} > (6/29)^3 \text{ のとき } f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) = \frac{841}{108}\left(\frac{Y}{Y_n}\right) + \frac{4}{29};$$

$$50 \quad f\left(\frac{Z}{Z_n}\right) = \left(\frac{Z}{Z_n}\right)^{1/3} \quad \frac{Z}{Z_n} > (6/29)^3 \text{ のとき } f\left(\frac{Z}{Z_n}\right) = \frac{841}{108}\left(\frac{Z}{Z_n}\right) + \frac{4}{29}.$$

51 X_n , Y_n 及び Z_n は精製水の 3 刺激値である。

52

53 分光光度法において、透過率は、可視スペクトルの全範囲の異なる任意の波長で得
54 られる。そしてそれらの値を視角 2° の視野の測色標準観測者及び CIE 標準光源 C の
55 荷重係数 \bar{x}_λ , \bar{y}_λ 及び \bar{z}_λ を使って計算される（国際照明委員会の刊行物参照, CIE）。

56 分光光度法

57 装置の製造元の説明書に従い適切に分光光度計を操作し、10nm 以下の間隔で少なく
58 とも 400nm から 700nm で透過率 T を求める。透過率は%で表わせる。3 刺激値 X , Y
59 及び Z 並びに色空間座標 L^* , a^* 及び b^* を計算する。

60

61 色調の測定

62 装置の製造元の説明書に従い装置の校正を行う。システムの性能試験は装置の使用
63 状況によって各測定前又は決められた間隔毎に行う。そのために測定範囲において
64 認定された標準物質¹を用いる。

65 装置の製造元の説明書に従い操作し、同じ測定条件（例えば、セル長、温度など）
66 で試料溶液と標準液を測定する。

67 透過率の測定には、標準として精製水を用い、可視スペクトルの全ての波長で透過
68 率を 100.0% とする。そして、CIE 標準光源 C の 3 刺激値を色空間座標 $L^* = 100$, $a^* =$
69 0 及び $b^* = 0$ に対して、それぞれ 98.03, 100.00 及び 118.11 とする。

70 標準測定は、精製水又は新たに調製した薬局方の標準液の色空間座標を用いて行わ
71 れるか、若しくは同じ条件で測定された装置の製造元のデータベースにあるそれぞ
72 れ色空間座標を用いて行われる。

73 試料溶液が濁っていたり、霞んでいたりしているときは、ろ過又は遠心分離する。
74 ろ過又は遠心分離しない場合は、濁りや霞を結果として報告する。気泡が入らない
75 ようにし、入った場合は除去する。

76 色、色差又は決められた色との差に関して、機器測定法を用いて 2 つの溶液を比較す
77 る。試料溶液 t と標準液 r の色差 ΔE^*_{tr} を次式で求める。

¹装置の製造元が求める認定されたフィルター又は標準液

$$\Delta E^*_{tr} = \sqrt{(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2}$$

79 ここで、 ΔL^* 、 Δa^* 及び Δb^* は色空間座標における差

80

81 CIELab 色空間座標の代わりに CIELCh 色空間座標を用いることもできる。この場合、
82 彩度 C^* を計算し、色相 H^* について、色差を比較する。色相角度 h がまた使われる。

$$C^* = \sqrt{(a^*)^2 + (b^*)^2}$$

$$\Delta H^* = \sqrt{(\Delta E^*_{tr})^2 - (\Delta L^*)^2 - (\Delta C^*)^2}$$

$$h_{ab} = \tan^{-1}\left(\frac{b^*}{a^*}\right)$$

86

87 局方要件への適合性

88 目視法を設定している既存品目に、機器測定法を適用する場合には以下の方法に従
89 う。まず、 ΔE^*_{tr} を求める式で示したように標準液に対する試料溶液の ΔE^* を求め
90 る。試料溶液に対して ΔE^* が最小となるように、標準液として最も近くにあるもの
91 を選ぶ。この最も近くにある標準液の色相と強度が、医薬品各条の要求を満たす場
92 合に、試料溶液は医薬品各条の規格に適合する。

93 試料溶液が標準スケールの無色側の端にある、すなわち無色と最も薄い標準液の一
94 つの範囲にあれば、精製水に対する試料溶液の ΔE^* を求める。精製水に対する試料
95 溶液の ΔE^* が精製水に対する標準液の ΔE^* 未満である場合に、試料溶液は適合とす
96 る。

97

98 $L^*a^*b^*$ 色空間内の位置の同定

99 測定機器から $L^*a^*b^*$ 色空間の範囲内で試料溶液の実際の位置に関する情報が得られ
100 る。適当なアルゴリズムを用いる事によって、対応する局方の標準液（「試料溶液
101 は標準液 XY と同じ」又は「試料溶液は標準液 XY に近い」若しくは「試料溶液は標
102 準液 XY と XZ のあいだ」）が得られる。