

微量水分の高精度測定に向けた 水のスペクトル解析に最適なフィッティング関数の検証

Evaluation of line shape profiles for spectral analysis of H₂O

to accurately measure trace moisture

産総研¹, ニコラス・コペルニクス大学²

○橋口 幸治¹, Lisak Daniel², Cygan Agata², Ciuryło Roman², 阿部 恒¹

NMIJ/AIST¹, UMK²,

○Koji Hashiguchi¹, Daniel Lisak², Agata Cygan², Roman Ciuryło², Hisashi Abe¹

E-mail: koji.hashiguchi@aist.go.jp

産業のハイテク化に伴い、ガス中に微量に存在する水(微量水分)を精確に測定する需要が高まっている。この状況に対応するため、これまでにキャビティリングダウン分光法(CRDS)を用いた微量水分測定装置の開発を進めてきた。開発した装置では、HeNe レーザーを参照として共振器長を制御することで測定周波数の精度を確保している。また、プローブレーザーの周波数を波長計で制御することで、ハイフィネス共振器であっても光を透過させることを可能にしている(波長計制御型 CRDS[1])。開発した装置を用いて、微量水分の吸収スペクトルの高感度測定を実現した[2]。

大気圧近辺で測定した吸収スペクトルを解析する際には一般的にローレンツ関数(LP)が用いられるが、LP は吸収線が主に衝突広がりで形成されているとする近似式であり、CRDS を用いて SN 比良く測定したスペクトルを LP では精確に再現できない可能性がある。実際、得られた吸収スペクトルを LP を用いてスペクトル解析したところ、フィッティング残差に構造が見られることがわかった(図 1 参照)。これが微量水分測定の結果に影響を与える可能性がある。本発表では、いくつかの関数を用いて解析を行い、フィッティング残差の比較、及びオーバーフィッティングすることが無いように新たに導入した指標(赤池情報量基準(AIC)[3])の比較を行い、実験で得られたスペクトルの解析に最適な関数について検証した結果を報告する。また、最適な関数で解析した結果と LP で解析した結果を比較し、用いるフィッティング関数が微量水分測定の結果に与える影響についても報告する。[4] 本研究は科研費 17K14507 の助成を受けたものである。

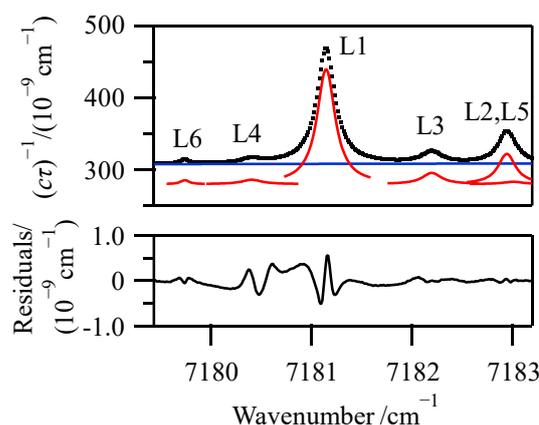


Fig.1 Acquired spectrum of trace moisture
The spectrum was analyzed with LPs
for L1–L6 absorption lines.

[1] K. Hashiguchi et al., Sens. Actuators A 241, 152 (2016).

[2] K. Hashiguchi et al., AIP Advances 9, 125331 (2019).

[3] H. Akaike, in Proc. 2nd Int. Symp. on Information Theory, ed. B. N. Petrov and F. Csaki, 267 (1973).

[4] K. Hashiguchi et al., Jpn. J. Appl. Phys. 61, 014001 (2022).