



Title	光分析における高精度情報抽出に関する研究
Author(s)	千賀, 康弘
Citation	大阪大学, 1992, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.11501/3089976">https://doi.org/10.11501/3089976</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名 千 賀 康 弘

博士の専攻分野の名称 博 士 (工 学)

学 位 記 番 号 第 1 0 2 9 8 号

学位授与年月日 平成 4 年 4 月 1 日

学位授与の要件 学位規則第4条第2項該当

学 位 論 文 名 光分析における高精度情報抽出に関する研究

論文審査委員 (主査) 教授 南 茂夫

教 授 樹下 行三 教 授 一岡 芳樹 教 授 増原 宏

### 論 文 内 容 の 要 旨

物質の持つ光吸収・発光等の現象に基づく光分析において、従来の光分析機器出力から、より高精度な情報を分析現場でかつ実時間で抽出することを目的として、マイクロコンピュータを機器に結合し、オンラインでデータ解析を行なう各種アルゴリズムを開発した。また、複数の成分からなる混合物試料の定性分析における分析信頼性を向上させるため、光スペクトルを2次元パターン展開した新しい分光システムを提案・開発した。

第1章では、従来からあるアナログ出力形式の分光機器に直接結合して数学的解析処理を実現するために新たに開発したデータ収集・処理専用装置について、この詳細と有用性を示した。第2章では、分光機器出力スペクトル波形のディコンポリューション処理において最も重要なスリット関数の形状を、測定波形自体から推定する手法を提案した。また、特に三角状スリット関数の場合に有効な雑音成分の平滑化を考慮したディコンポリューション法についても提案し、実測データに適用してこの有用性を示した。第3章では、観測波形中のピーク・パラメータを、分析機器に結合したパソコンコンピュータでオンライン抽出するために開発した高速アルゴリズムについて述べた。第4章では、高速液体クロマトグラフィ (HPLC) と蛍光スペクトル測定を結合して分光スペクトルの2次元展開を実現した新しいシステムの開発結果について述べた。ここでは試料を連続光(白色光)で励起して蛍光をマルチチャネル分光測定するシステム、および試料を空間的に分光励起して蛍光測定を行なうマルチチャネル蛍光励起スペクトル測定システムを考案・試作し、HPLCと結合して各々の有用性を評価した。第5章では、蛍光測定を2次元パターン化した蛍光励起・発光マトリックス (EEM) を高速かつ高感度で測定するために開発した、回転型干渉フィルタ分光受光系を持つシステム、および偏波面分割型フーリエ分光受光系を持つシステムについて述べた。さらに測定されたEEMに対して固有値解析に基づくスペクトル分離手法を適用し、開発したシステムおよびデータ解析法の有用性を示した。第6章では、光熱分光法に2次元パターン検出法を適用して、熱変化より生ずる屈折率変化を光干渉法によって空間的に測定する新しい測定法を提案し、この方法に基づいて開発した高感度かつ安定なシステムについて述べた。最後に以上の研究成果を総括した。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、光スペクトル波形を用いた物質分析、とくに、多成分からなる混合物試料の分析における信頼性の向上を目的として、1次元スペクトル波形を対象とした数学的な情報抽出手法の開発、および、光スペクトルを多次元に展開して情報量の重なりを減少させる新しい測定システムの開発成果をまとめたものであり、その主な成果を要約すると次のとおりである。

- (1) 従来のアナログ出力型分光機器出力データに対する数学的処理には、高い波長走査精度を持ったデータ収集装置が必要であることを示し、開発したデータ収集・処理装置が、特に微弱光測定およびそのデータ処理に有効であることを、ラマン散乱測定に適用して確認している。
- (2) 光スペクトル波形のディコンボリューション処理は、従来装置関数の形状が既知でないと実行不能であったが、三角状装置関数の場合には測定波形自体からその幅を推定することが可能であることを示し、この推定手法を赤外吸収スペクトル波形に適用して、サンプル波数間隔以内の精度で装置関数幅が推定できることを明らかにしている。
- (3) 従来のディコンボリューション法で問題となっていた雑音成分の誘発現象を、特に効果的に抑制できる新しいディコンボリューション法を考案し、実測赤外吸収スペクトル波形に適用してその有用性を確認している。
- (4) スペクトル波形のピーク分離処理を、パーソナルコンピュータ上でオンライン処理するための新しいアルゴリズムを考案し、発光スペクトルのピーク分離に適用した結果より、この方法が演算時間、メモリ容量、精度の点で効果的で、実用性が高いことを実証している。
- (5) 多成分からなる混合物試料の分析では、光スペクトル測定における走査軸を複数化して分光情報を2次元パターン化することにより、情報の重なりを減少させ、分析信頼性を向上できることを提案している。この2次元パターン化を実現するため、専用システムを開発して蛍光性混合物試料の分析に適用し、その有用性を確認している。
- (6) 蛍光性混合物試料に対する物理的分離を用いない2次元パターン化法として、蛍光励起・発光マトリックス測定法に着目し、高感度・高速測定可能な専用システムを開発して、これが特に定性分析に有用であることを明らかにしている。
- (7) 従来、点検出方式が用いられていた光熱分光法に対して2次元パターン検出法を適用し、測定データの中に含まれる熱拡散対流現象に基づく誤差を除去しうるシステムを開発して、その実用性を検討している。

以上のように本論文は、多成分からなる混合物試料に対する光分析において、高精度な情報抽出法および新しい分析システムを提案すると共に、その有用性を論じたものであり、計測工学、分析化学の分野に寄与するところが大きい。よって、本論文は博士論文として価値あるものと認める。