

混合物のスペクトルデータのみから物質と濃度の推定

研究代表者 片山 建二 研究員

スペクトル計測による化学分析

混合物 スペクトル

リファレンスがなし、
? 化学種
? 濃度

リファレンスデータを必要としないスペクトル解析

➤ **Multivariate Curve Resolution** 解析
R. Gargallo, et al, Chemom. Intell. Lab. Syst. 76,101-110 (2005)

混合スペクトル → MCR → 純スペクトル

濃度
— X %
— Y %
— Z %

計算過程
初期推定 (SVD) → 最適化 → 解

数値的初期推定 (SVD) のため、局所解に陥る

cos-s map MCR法

混合物スペクトル

Similarity map

$\text{cosine similarity} = \frac{a \cdot b}{|a||b|}$

推定スペクトル

スペクトル制限MCR

- “Similarity map” を導入したパラメータレススペクトル分解手法の開発。
- “cos-s map MCR” 法を使ったリファレンスデータを使わない異なる複数分析法への適用 (吸光, X線回折, NMR, Raman)。
- リファレンスを得られない、反応プロセス中の中間種・不明種の解析に威力。

NMRスペクトルの例

¹H-NMR スペクトル, 16個の4種混合スペクトル

回復スペクトル

推定濃度

スペクトル一致度 ~85%
濃度誤差 8%以下

実適用例の紹介～太陽光水分解BiVO₄～

Phase junction試料

- 異なる相の混合試料 >>> No.1~10
- 焼結温度を変えて異なる相の試料を準備 >>> No.11~15

相組成の回復

最終回復スペクトル

相組成とスペクトルを回復することに成功

Analyst, 146, 5045, 2021