(19)日本国特許庁(JP)　(12)特　許　公　報(B2)　(11)特許番号
特許第6981817号
(P6981817)
(45)発行日　令和3年12月17日(2021.12.17)　(24)登録日　令和3年11月22日(2021.11.22)

(51)Int.Cl.　F I
G01N 21/27 (2006.01)　G01N 21/27 F
G01N 21/3504 (2014.01)　G01N 21/3504

請求項の数 9　(全 11 頁)

(21)出願番号　特願2017-166784(P2017-166784)
(22)出願日　平成29年8月31日(2017.8.31)
(65)公開番号　特開2019-45240(P2019-45240A)
(43)公開日　平成31年3月22日(2019.3.22)
審査請求日　令和1年12月19日(2019.12.19)

(73)特許権者　000155023
株式会社堀場製作所
京都府京都市南区吉祥院宮の東町２番地
(74)代理人　100121441
弁理士　西村　竜平
(74)代理人　100154704
弁理士　齊藤　真大
(72)発明者　西村　克美
京都府京都市南区吉祥院宮の東町２番地
株式会社堀場製作所内
(72)発明者　中谷　茂
ドイツ連邦共和国　６１４４０　オーバーウルゼル　ハンスメスシュトラーセ　６
ホリバ　ヨーロッパ　ゲーエムベーハー内

最終頁に続く

(54)【発明の名称】分光分析装置及び分光分析方法

(57)【特許請求の範囲】
【請求項１】
試料に光を照射して得られる分光スペクトルから前記試料に含まれる測定対象成分の濃度を測定する分光分析装置であって、
検量線を用いて前記分光スペクトルから前記測定対象成分の濃度を算出する濃度算出部と、
前記検量線の作成時の温度と前記測定対象成分の濃度測定時の温度との温度差分に伴う前記測定対象成分の濃度変化を、前記測定対象成分の濃度を求める波長域又は波数域に応じた温度補正式を用いて補正する濃度補正部とを備え、
前記温度補正式は、温度が高くなるに連れて補正前の濃度を小さくして出力する式であり、
前記濃度補正部は、前記測定対象成分の測定レンジに応じて前記温度補正式を変更する、分光分析装置。
【請求項２】
前記濃度算出部は、複数の測定対象成分の濃度を多変量解析を用いて算出するものであり、
前記濃度補正部は、前記複数の測定対象成分毎に設定された前記温度補正式を用いて、各測定対象成分の濃度を補正するものである、請求項１記載の分光分析装置。
【請求項３】
前記試料はガスであり、

前記温度補正式は、前記測定対象成分の温度により生じるエネルギー準位の変化を補正するためのものである、請求項１又は２に記載の分光分析装置。
【請求項４】
濃度既知の標準試料による複数の温度それぞれの分光スペクトルを取得する標準スペクトル取得部と、
前記複数の温度の標準スペクトルから前記温度補正式を生成する補正式生成部とを更に備える、請求項１乃至３の何れか一項に記載の分光分析装置。
【請求項５】
前記補正式生成部は、前記濃度算出部による濃度算出に用いられる波長域又は波数域が変更された場合に、当該変更された波長域又は波数域に対応する温度補正式に更新する、請求項４記載の分光分析装置。
【請求項６】
前記補正式生成部は、前記検量線を作成する際に得られた前記標準スペクトルから前記温度補正式を生成する、請求項４又は５記載の分光分析装置。
【請求項７】
試料に光を照射して得られる分光スペクトルから前記試料に含まれる測定対象成分の濃度を測定する分光分析装置であって、
検量線を用いて前記分光スペクトルから前記測定対象成分の濃度を算出する濃度算出部と、
前記検量線の作成時の温度と前記測定対象成分の濃度測定時の温度との温度差分に伴う前記測定対象成分の濃度変化を、所定の温度補正式を用いて補正する濃度補正部とを備え、
前記温度補正式は、温度が高くなるに連れて補正前の濃度を小さくして出力する式であり、
前記濃度補正部は、前記測定対象成分の測定レンジに応じて前記温度補正式を変更する、分光分析装置。
【請求項８】
試料に光を照射して得られる分光スペクトルから前記試料に含まれる測定対象成分の濃度を測定する分光分析方法であって、
検量線を用いて前記分光スペクトルから前記測定対象成分の濃度を算出する濃度算出ステップと、
前記検量線の作成時の温度と前記測定対象成分の濃度測定時の温度との温度差分に伴う前記測定対象成分の濃度変化を、前記測定対象成分の濃度を求める波長域又は波数域に応じた温度補正式を用いて補正する濃度補正ステップとを備え、
前記温度補正式は、温度が高くなるに連れて補正前の濃度を小さくして出力する式であり、
前記濃度補正ステップにおいて、前記測定対象成分の測定レンジに応じて前記温度補正式を変更する、分光分析方法。
【請求項９】
試料に光を照射して得られる分光スペクトルから前記試料に含まれる測定対象成分の濃度を測定する分光分析装置に用いられる分光分析プログラムであって、
検量線を用いて前記分光スペクトルから前記測定対象成分の濃度を算出する濃度算出部としての機能と、
前記検量線の作成時の温度と前記測定対象成分の濃度測定時の温度との温度差分に伴う前記測定対象成分の濃度変化を、前記測定対象成分の濃度を求める波長域又は波数域に応じた温度補正式を用いて補正する濃度補正部としての機能とをコンピュータに備えさせるものであり、
前記温度補正式は、温度が高くなるに連れて補正前の濃度を小さくして出力する式であり、
前記濃度補正部は、前記測定対象成分の測定レンジに応じて前記温度補正式を変更する

ことを特徴とする分光分析プログラム。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
本発明は、例えばフーリエ変換赤外分光法等の赤外分光法を用いた分光分析装置及び分光分析方法に関するものである。
【背景技術】
【０００２】
従来、例えば排ガス等の試料に含まれる測定対象成分の濃度を測定するものとして、特許文献１に示すように、例えばＦＴＩＲ（フーリエ変換赤外分光）法を用いたものがある。
【０００３】
このＦＴＩＲ法を用いた分光分析装置は、試料が導入される測定セルと、当該測定セルに向かって赤外光を照射する光照射部と、前記測定セルを通過した光の強度を検出する光検出器とを備えている。そして、この分光分析装置は、光検出器により得られた光強度信号を用いて排ガスの光吸収スペクトルを算出して、この光吸収スペクトルの吸光度から、測定対象成分の濃度を算出する。ここで、光吸収スペクトルの吸光度から濃度を算出するにあたっては、光吸収スペクトルの吸光度と当該吸光度が示す測定対象成分の濃度との検量線を用いている。
【０００４】
上記の分光分析装置は、試料測定時において測定セルの温度は一定に温調されている。この測定セルの温度が検量線作成時の測定セルの温度と異なる場合には、検量線により得られた濃度に誤差が生じてしまう。
【０００５】
この温度変化による誤差を減少させるものとしては、特許文献２に示すように、温度毎に検量線を補正するものある。具体的にこの分光分析装置は、予め同じサンプルを用いて基準温度と基準温度とは異なる温度とでスペクトルを測定し、それらの差スペクトルを求め、サンプルの温度変化に応じて係数をかけた差スペクトルを、測定スペクトルに加減することにより基準温度で測定したスペクトルと同等なスペクトルに変換し、サンプルの温度変化による検量線計算結果を補正している。
【先行技術文献】
【特許文献】
【０００６】
【特許文献１】特開平９－１０１２５７号公報
【特許文献２】特開２００５－３３１３８６号公報
【発明の概要】
【発明が解決しようとする課題】
【０００７】
そこで本発明は、上記問題点を一挙に解決すべくなされたものであり、検量線を補正するという発想ではなく、検量線により得られた濃度を温度により補正するという発想の下になされたものである。
【０００８】
ここで、気体の状態方程式により測定対象成分の濃度は絶対温度が高くなるに連れて小さくなることから、検量線により得られる濃度の測定誤差は、絶対温度が高くなるに連れて補正後の濃度が大きくなるような補正式を用いて補正することが考えられる。
【０００９】
ところで、本願発明者は、測定セルの温度を１００℃から１９０℃まで変化させたときのCO_2、ＣＯ、ＮＯ、C_3H_8の濃度を測定した。なお、このとき用いた検量線は、１８０℃の測定セルによって作成したものである。
【００１０】

そのときの各ガス成分の濃度変化を図３に示している。図３に示すように、CO_2濃度は、絶対温度に比例して変化するという気体の状態方程式を用いた補正式では補正できないことが分かった。また、ＮＯ濃度やC_3H_8濃度についても温度範囲によっては同様の挙動を示すことが分かった。

【００１１】

これらの挙動は、試料が高濃度の場合には、光吸収スペクトルが飽和（ピークアウト）してしまうので、光吸収スペクトルにおいて吸収帯の裾野の吸光度の小さな波長域又は波数域の吸光度を用いていることが原因であると考えられる。具体的には、シミュレーションの結果において、光吸収スペクトルのうち、吸収帯の中央領域では、従来の理屈通りに温度が上がるに連れて強度が下がっているが、中央領域から離れた裾野の領域では、温度が上がるに連れて強度が上がる結果となっている。この現象については、図４に示すように、いくつか存在するエネルギー準位の異なる回転状態の存在確率が、温度によって変化するためのであると考えられる。

【００１２】

このように本発明では、気体の状態方程式を用いた補正に頼ることなく、補正検量線作成時の温度と試料測定時の温度との変化に対する濃度変化に柔軟に対応して補正することをその主たる課題とするものである。

【課題を解決するための手段】

【００１３】

すなわち本発明に係る分光分析装置は、試料に光を照射して得られる分光スペクトルから前記試料に含まれる測定対象成分の濃度を測定する分光分析装置であって、検量線を用いて前記分光スペクトルから前記測定対象成分の濃度を算出する濃度算出部と、前記検量線の作成時の温度と前記濃度測定時の温度との温度差分に伴う前記測定対象成分の濃度変化を、前記測定対象成分の濃度を求める波長域又は波数域に応じた温度補正式を用いて補正する濃度補正部とを備えることを特徴とする。

【００１４】

また、本発明に係る分光分析方法は、試料に光を照射して得られる分光スペクトルから前記試料に含まれる測定対象成分の濃度を測定する分光分析方法であって、検量線を用いて前記分光スペクトルから前記測定対象成分の濃度を算出する濃度算出ステップと、前記検量線の作成時の温度と前記濃度測定時の温度との温度差分に伴う前記測定対象成分の濃度変化を、前記測定対象成分の濃度を求める波長域又は波数域に応じた温度補正式を用いて補正する濃度補正ステップとを備えることを特徴とする。

【００１５】

このような本発明によれば、検量線の作成時の温度に対する濃度測定時の温度の変化分を補正するための温度補正式を用いて、測定対象成分の濃度を補正しているので、検量線を補正することなく、測定対象成分の濃度を補正することができる。また、温度補正式を測定対象成分毎に生成しておくことによって、絶対温度の増減に伴う測定対象成分の濃度の増減の挙動に合わせた補正を行うことができる。さらに、これによって、測定対象成分の濃度の補正をリアルタイムに行うことができる。

【００１６】

分光スペクトルは、複数の成分に起因する吸光度信号が重畳する波長域又は波数域が存在したり、ピーク強度が飽和する波長域又は波数域が存在したりする。これらの影響を低減して精度良く濃度を測定するために、前記濃度算出部は、前記分光スペクトルにおける所定の波長域又は波数域を用いて前記測定対象成分の濃度を算出するものとされる。このとき、精度良く温度補正を行うためには、前記濃度補正部は、前記測定対象成分の濃度を求める波長域又は波数域に応じた温度補正式を用いることが望ましい。

【００１７】

測定対象成分の種類や測定対象成分の測定レンジによっても濃度算出部が測定対象成分の濃度を算出する際に用いる波長域又は波数域が異なることになる。そのため、精度良く温度補正を行うためには、前記濃度補正部は、前記測定対象成分の種類又は前記測定対象

成分の測定レンジに応じて前記温度補正式を変更することが望ましい。

【００１８】

前記濃度算出部は、複数の測定対象成分の濃度を多変量解析を用いて算出するものであり、前記濃度補正部は、前記複数の測定対象成分毎に設定された前記温度補正式を用いて、各測定対象成分の濃度を補正するものであることが望ましい。

【００１９】

気体の状態方程式を用いた補正では補正できない挙動を示す測定対象成分の濃度を好適に補正するためには、前記温度補正式は、温度が高くなるに連れて小さい値となることが望ましい。このとき、前記温度補正式は、前記測定対象成分の温度により生じるエネルギー準位の変化を補正するためのものとなる。

【００２０】

前記試料はガスである場合には、測定対象成分の温度により生じるエネルギー準位の変化が生じ易く、本発明を適用した場合の効果が一層顕著となる。

【００２１】

温度補正式を自動的に算出するための具体的な実施の態様としては、濃度既知の標準試料による複数の温度それぞれの分光スペクトルを取得する標準スペクトル取得部と、前記複数の温度の標準スペクトルから前記温度補正式を算出する補正式生成部とを更に備えることが望ましい。

【００２２】

濃度算出部により用いられる波長域又は波数域は、干渉成分の有無、測定対象成分の種類又は測定レンジ等によって変更される。この変更に対応して精度良く補正するためには、前記補正式生成部は、前記濃度算出部による濃度算出に用いられる波長域又は波数域が変更された場合に、当該変更された波長域又は波数域に対応する温度補正式に更新することが望ましい。

【００２３】

分光分析装置は定期的に検量線を更新する処理が行われる。この検量線の更新処理に合わせて補正式を更新してそれらの処理を共通化させるためには、前記補正式生成部は、前記検量線作成時に得られた前記標準スペクトルから前記温度補正式を算出することが望ましい。

【発明の効果】

【００２４】

このように構成した本発明によれば、気体の状態方程式を用いた演算だけでは補正が困難な成分においても、成分毎に異なる温度影響を、検量線を補正することなく、検量線作成時の温度と試料測定時の温度との変化に対する濃度変化に柔軟に対応して補正することができる。

【図面の簡単な説明】

【００２５】

【図１】本実施形態の赤外分光分析装置の構成を示す模式図である。

【図２】同実施形態の情報処理装置の機能構成図である。

【図３】各ガス成分の絶対温度と濃度との関係を示すグラフである。

【図４】温度変化に伴うエネルギー準位の変化を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【００２６】

以下に本発明に係る赤外分光分析装置の一実施形態について図面を参照して説明する。

【００２７】

本実施形態の赤外分光分析装置１００は、例えば自動車などの内燃機関から排出される試料である排ガスに含まれる複数の成分の濃度を時系列データとして測定する排ガス分析装置である。

【００２８】

具体的にこの赤外分光分析装置１００は、図１に示すように、例えば自動車のテールパ

イプから出る排ガスの一部又は全部を試料採取部２により採取して、当該試料採取部２により採取された排ガスを希釈することなく測定セル３に導入して、ＦＴＩＲ法により排ガス中の例えば一酸化炭素（ＣＯ）、二酸化炭素（CO_2）、一酸化窒素（ＮＯ）、二酸化窒素（NO_2）、窒素酸化物（NO_X）、水（H_2O）等の複数の成分について各濃度を測定するものである。この測定セル３の周囲には、測定セル３及び測定セル３内のガスの温度を温調するためのヒータ等の温調機構Ｈが設けられている。また、測定セル３の温度は温度センサＴ１により検出される。この温調機構Ｈは、温度センサＴ１の検出温度に基づいて演算装置ＣＯＭにより所定の温度となるように制御される。

【００２９】

また、赤外分光分析装置１００において、測定セル３が設けられた排ガスラインＬ１には、測定セル３の下流側に、排ガスを測定セル３に導入するための吸引ポンプ４が設けられている。その他、排ガスラインＬ１には、排ガスの流量を調整するバルブ５、オリフィス５１、排ガスの流量を測定する流量計６、排ガス中の塵埃を除去するフィルタ７等が設けられている。また、排ガスラインＬ１又は測定セル３には、光検出器９の校正を行うためのゼロガス、スパンガスを測定セル３に供給する基準ガス供給ラインＬ２、及び、排ガスラインＬ１又は測定セル３を清浄するためのパージガスラインＬ３が接続されている。

【００３０】

さらに、赤外分光分析装置１００は、測定セル３に向かって干渉させた赤外光を照射する光照射部８と、測定セル３を通過して射出された光の強度を検出する光検出器９とを備えている。そして、赤外分光分析装置１００の演算装置ＣＯＭは、光検出器９により得られた光強度信号を用いて排ガスの分光スペクトルのうち光吸収スペクトルを算出して、この光吸収スペクトルにおける所定の波長域又は波数域の吸光度から、複数の測定対象成分の濃度を算出する。

【００３１】

そして、赤外分光分析装置１００の演算装置ＣＯＭは、図２に示すように、測定対象成分の吸光度と測定対象成分の濃度との関係を示す検量線データを格納する検量線格納部１０と、光吸収スペクトルと検量線データが示す検量線とから、測定対象成分の濃度を算出する濃度算出部１１と、温度補正式を用いて測定対象成分の濃度を補正する濃度補正部１２とを備えている。

【００３２】

検量線格納部１０は、所定の温度（例えば基準温度）下で作成された検量線データを格納している。この検量線は、各成分の濃度（複数の代表値であり、例えばＣＯの場合には、濃度２％、４％、６％、８％等である。）とそれぞれの吸光度の関係を定めたものである。この検量線データは、後述する検量線生成部１６により作成することができる。なお、検量線データは演算式であってもよいし、表形式であってもよい。

【００３３】

濃度算出部１１は、光検出器９から光強度信号を取得するとともに、検量線格納部１０から検量線データを取得して、光強度信号から光吸収スペクトルを算出し、当該光吸収スペクトルにおける所定の波長域又は波数域の吸光度と検量線データが示す検量線とから各測定対象成分の濃度を多変量解析により算出する。

【００３４】

濃度補正部１２は、温度センサＴ１の検出温度に基づいて、濃度算出部１１により得られた各測定対象成分の濃度を、当該各測定対象成分に設定された温度補正式を用いて温度補正する。この温度補正式を示し補正式データは、補正式格納部１７に格納されている。

【００３５】

ここで、温度補正式は、検量線作成時における測定セル３の温度と濃度測定時における測定セル３の温度との温度差分に伴う測定対象成分の濃度変化を補正するためのものであり、測定対象成分の濃度を求める波長域又は波数域に応じて求められている。本実施形態の温度補正式は、多項式である温度－濃度関係式（例えば後述する数２の式）から求めることができる。

【００３６】
具体的に温度－濃度関係式は、測定対象成分の種類に応じて、（１）絶対温度が高くなるに連れて濃度が大きくなる式、（２）絶対温度が高くなるに連れて濃度が小さくなる式、（３）絶対温度が高くなるに連れて所定の範囲では濃度が大きくなり、その範囲を超えた範囲では濃度が小さくなる式等が考えられる。
【００３７】
例えば、CO_2の温度－濃度関係式は、温度が高くなるに連れて濃度が単調増加する式である。また、ＣＯの温度－濃度関係式は、温度が高くなるに連れて濃度が単調減少する式である。さらに、ＮＯの温度－濃度関係式は、温度が高くなるに連れて濃度が単調増加から単調減少に切り替わる式である。なお、CO_2の温度変化に伴う濃度変化は、温度変化により生じるエネルギー準位の変化に起因するものと考えられるので、CO_2の温度補正式は、その温度変化により生じるエネルギー準位の変化を補正するための式ということができる。
【００３８】
この温度補正式を生成するために、赤外分光分析装置１００の演算装置ＣＯＭは、濃度既知の標準試料による複数の温度それぞれの光吸収スペクトルを取得する標準スペクトル取得部１３と、複数の温度の標準スペクトルから温度補正式を生成する補正式生成部１４とを更に備えている。
【００３９】
標準スペクトル取得部１３は、検量線作成時等において標準試料の複数の温度それぞれの標準スペクトルを示す複数のスペクトルデータを取得して、当該標準スペクトル格納部１５に格納する。ここで、標準スペクトルデータは、標準スペクトル取得部１３が光検出器９からの光強度信号を取得して算出するものであってもよいし、濃度算出部１１等の別の機能部が検量線作成時に光検出器９からの光強度信号を取得して算出したものを標準スペクトル取得部１３が受信するものであってもよい。
【００４０】
補正式生成部１４は、濃度算出部１１による複数の測定対象成分の濃度の算出に用いられる波長域又は波数域それぞれに対応する温度補正式を示す補正式データを生成するものである。また、補正式生成部１４は、濃度算出部１１による各測定対象成分の算出に用いられる波長域又は波数域が変更された場合に、当該変更された波長域又は波数域に対応する温度補正式を示す補正式データを生成して更新する。
【００４１】
次に赤外分光分析装置１００の検量線作成に伴って行われる温度補正式の算出処理について説明する。
【００４２】
所定の基準温度（例えば１００℃）に温調した測定セル３に濃度既知の標準試料（標準ガス）を導入する。そして、この状態で測定セル３に光照射部８から赤外光を測定セル３に照射し、測定セル３を透過した光を光検出器９により検出する。この光検出器９からの光強度信号から標準スペクトル取得部１３等が標準スペクトルを算出して標準スペクトル格納部１５に格納する。ここで、標準ガスが導入された測定セル３を前記基準温度から例えば１０℃ごとに上昇させて各温度での標準スペクトルデータも取得する。
【００４３】
そして、分光分析装置１００の検量線生成部１６は、基準温度で得られた標準スペクトルデータから各測定対象成分の濃度算出に用いる波長域又は波数域を決定して、当該波長域及び波数域における吸光度を用いて検量線を示す検量線データを生成する。
【００４４】
また、濃度算出部１１は、当該波長域及び波数域において、その他の温度で得られた標準スペクトルデータと前記検量線データとから各温度の測定対象成分の濃度を求める。そして、補正式生成部１４は、その標準スペクトルデータから得られた各温度の測定対象成分の濃度と、標準ガスの測定対象成分の既知濃度とから温度補正式を示す補正式データを

生成する。

【００４５】

以下に、濃度補正部１２により用いられる温度補正式について説明する。濃度補正部１２により用いられる温度補正式は、以下により示すことができる。

【００４６】

【数１】

$$C_{comp} = \frac{C_{unk}}{a_3T^3 + a_2T^2 + a_1T + a_0}$$

ここで、C_{comp}は、測定対象成分の補正後の濃度であり、C_{unk}は、測定対象成分の補正前の濃度である。また、係数a_0～a_3は、フィッティングパラメータである。

【００４７】

この式（数１）は以下により求めることができる。

【００４８】

濃度既知の標準ガスを用いて得られた各温度に対する測定対象成分の濃度のグラフ（図３に示すグラフであり、横軸が温度、縦軸が濃度である。）を用いてフィッティングすると、以下の関係式（温度－濃度関係式）となる。なお、以下では３次式としているが、４次式以上としてもよいし、１次式又は２次式としてもよい。

【００４９】

【数２】

$$\frac{C_{bottle_meas}}{C_{bottle}} = a_3T^3 + a_2T^2 + a_1T + a_0$$

ここで、C_{bottle}は、標準ガスの測定対象成分の既知濃度である。また、C_{bottle_meas}は、各温度に対する標準ガスの測定対象成分の測定値である。係数a_0～a_3は、フィッティングパラメータである。

【００５０】

この関係式は、濃度未知の測定対象成分を測定した場合にも成立するので、補正後の濃度C_{comp}と、補正前の濃度C_{unk}との関係は次のようになる。

【００５１】

【数３】

$$\frac{C_{unk}}{C_{comp}} = a_3T^3 + a_2T^2 + a_1T + a_0$$

この関係式（温度－濃度関係式）を変形することによって上記式（数１）を得ることができる。

【００５２】

補正式生成部１４は、排ガスに含まれる複数の測定対象成分毎にそれぞれ係数a_0～a_3を算出して補正式データを生成する。この補正式生成部１４により得られた係数a_0～a_3を示す係数データは補正式格納部１７に格納される。

【００５３】

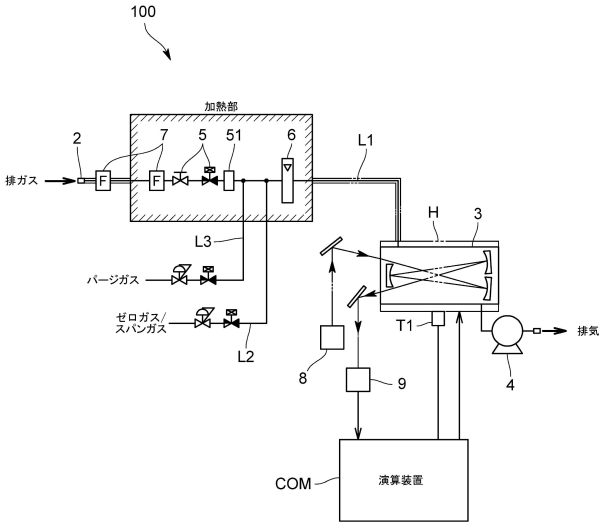
このように構成した本実施形態の赤外分光分析装置１００によれば、検量線の作成時の温度に対する濃度測定時の温度の変化分を補正するための温度補正式を用いて、測定対象成分の濃度を補正しているので、検量線を補正することなく、測定対象成分の濃度を補正することができる。また、温度補正式を測定対象成分毎に生成しておくことによって、絶対温度の増減に伴う測定対象成分の濃度の増減の挙動に合わせた補正を行うことができる。さらに、これによって、測定対象成分の濃度の補正をリアルタイムに行うことができる。

【００５４】

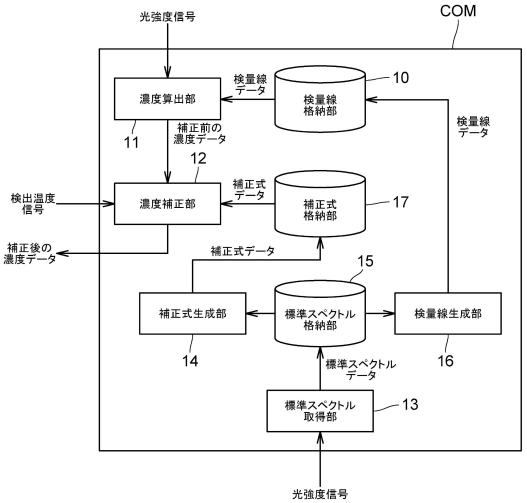
なお、本発明は前記実施形態に限られるものではない。

【００５５】
例えば、温度補正式は、検量線作成時に得られた標準スペクトルデータから求める構成の他に、検量線作成とは別に得られた標準スペクトルデータから求めるようにしてもよい。この場合、標準スペクトルデータを取得する際の測定セル３の温度は検量線作成時の温度と同一にする必要がある。
【００５６】
また、前記実施形態では、濃度補正部１２は、測定対象成分の濃度を求める波長域又は波数域に応じて、温度補正を行うか否かを判断してもよい。例えば、前記波長域又は波数域が吸収帯の中央領域ではなく、裾野の立ち上がり領域の場合にのみ、温度補正式を用いて濃度を補正するようにしてもよい。
【００５７】
さらに、濃度補正部１２は、測定対象成分の濃度が所定値以上の場合にのみ、温度補正式を用いて濃度を補正するようにしてもよい。
【００５８】
前記実施形態では、濃度補正部１２は、測定対象成分の測定レンジに応じて温度補正式を変更するものであってもよい。
【００５９】
さらに、前記実施形態では濃度算出部１１により得られた測定値を一回の補正により補正後の濃度を算出するように構成しているが、気体の状態方程式を用いた補正式で補正した濃度に対して前記実施形態と同様の補正を追加で行うように構成してもよい。
【００６０】
前記実施形態では、ＦＴＩＲ法を用いた分析装置について説明したが、ＮＤＩＲ法を用いた分析装置であっても良い。
【００６１】
前記実施形態では、測定セル３の温度Ｔ１を用いて温度補正を行う一例について説明をしたが、測定セル３内のガスの温度を用いて温度補正を行ってもよい。
【００６２】
また、本発明の分光分析装置は、赤外光を用いたものに限られず、紫外光又は可視光を用いたものであっても良い。
【００６３】
また、前記実施形態では、内燃機関から排出される排ガスを分析する排ガス分析装置に適用した場合について説明したが、工場や発電施設から排出される排ガスを分析するものであっても良いし、その他の試料ガスを分析するものであっても良い。さらに、試料がガスに限られず、薬液等の液体であってもよい。
【００６４】
その他、本発明は前記実施形態に限られず、その趣旨を逸脱しない範囲で種々の変形が可能であるのは言うまでもない。
【符号の説明】
【００６５】
１００・・・赤外分光分析装置
１１　・・・濃度算出部
１２　・・・濃度補正部
１３　・・・標準スペクトル取得部
１４　・・・補正式生成部

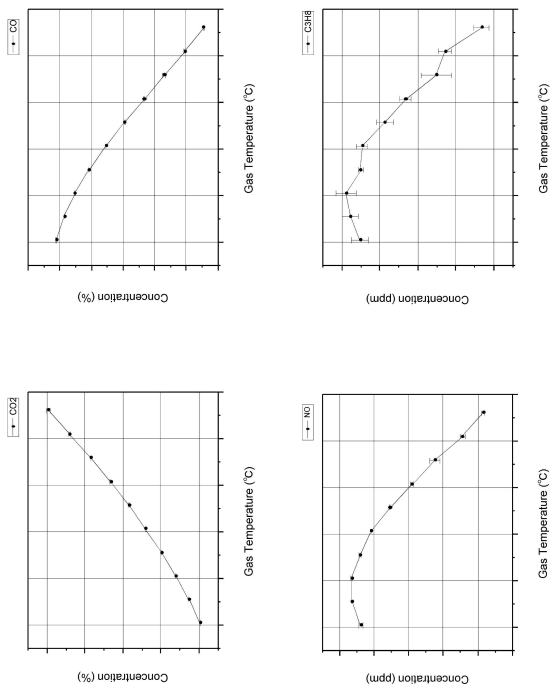
【図１】


100
加熱部
2
7
5
51
6
L1
排ガス
F
F
H
3
L3
パージガス
ゼロガス／
スパンガス
T1
排気
L2
8
9
4
COM
演算装置

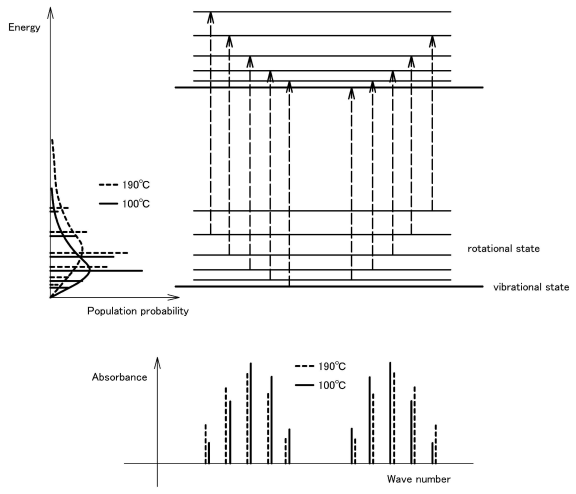
【図２】


光強度信号
COM
濃度算出部
検量線
データ
検量線
格納部
10
11
補正前の
濃度データ
検量線
データ
12
検出温度
信号
濃度補正部
補正式
データ
補正式
格納部
17
補正後の
濃度データ
補正式データ
15
補正式生成部
標準スペクトル
格納部
検量線生成部
14
16
標準スペクトル
データ
標準スペクトル
取得部
13
光強度信号

【図３】


CO
Gas Temperature (℃)
Concentration (%)
C3H8
Gas Temperature (℃)
Concentration (ppm)
CO2
Gas Temperature (℃)
Concentration (%)
NO
Gas Temperature (℃)
Concentration (ppm)

【図４】


Energy
190℃
100℃
rotational state
vibrational state
Population probability
Absorbance
190℃
100℃
Wave number

フロントページの続き

(72)発明者　ヤン　ポペ
ドイツ連邦共和国　６１４４０　オーバーウルゼル　ハンスメスシュトラーセ　６　ホリバ　ヨーロッパ　ゲーエムベーハー内

審査官　赤木　貴則

(56)参考文献　特表２００７－５２２４５５（ＪＰ，Ａ）
特開２００４－３０９２９６（ＪＰ，Ａ）
特表２０１７－５１５１１７（ＪＰ，Ａ）
特開２０１５－２２７８２８（ＪＰ，Ａ）
特開２０００－２０６０４１（ＪＰ，Ａ）
特開２０００－０７４８２８（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２０１５／１１９１２７（WO，Ａ１）
米国特許出願公開第２００２／００５０５６７（ＵＳ，Ａ１）
米国特許出願公開第２００５／０１９７７９４（ＵＳ，Ａ１）
中国特許出願公開第１０４６１４３３７（ＣＮ，Ａ）
松野　玄，近赤外分光分析法のプロセスモニタリングへの応用（２），Chemical Times，2006年04月01日，No. 2，pp. 10-14，https://kanto.co.jp/dcms_media/other/backmp6_pdf27.pdf

(58)調査した分野(Int.Cl.，ＤＢ名)
Ｇ０１Ｎ　２１／００－Ｇ０１Ｎ　２１／０１
Ｇ０１Ｎ　２１／１７－Ｇ０１Ｎ　２１／６１
ＪＳＴＰｌｕｓ／ＪＭＥＤＰｌｕｓ／ＪＳＴ７５８０（ＪＤｒｅａｍＩＩＩ）