



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 202321675 A

(43)公開日：中華民國 112 (2023) 年 06 月 01 日

(21)申請案號：111144244

(22)申請日：中華民國 111 (2022) 年 11 月 18 日

(51)Int. Cl. : G01N21/59 (2006.01)

G01N21/27 (2006.01)

(30)優先權：2021/11/22 日本

2021-189411

2022/06/24 日本

2022-102114

(71)申請人：日商堀場先進技術股份有限公司 (日本) HORIBA ADVANCED TECHNO, CO., LTD.
(JP)

日本

(72)發明人：中原達也 NAKAHARA, TATSUYA (JP)；斧田拓也 ONODA, TAKUYA (JP)；土
生一德 HABU, KAZUNORI (JP)

(74)代理人：卓俊傑；鮑亞嵐；卓孟儀

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：10 項 圖式數：3 共 23 頁

(54)名稱

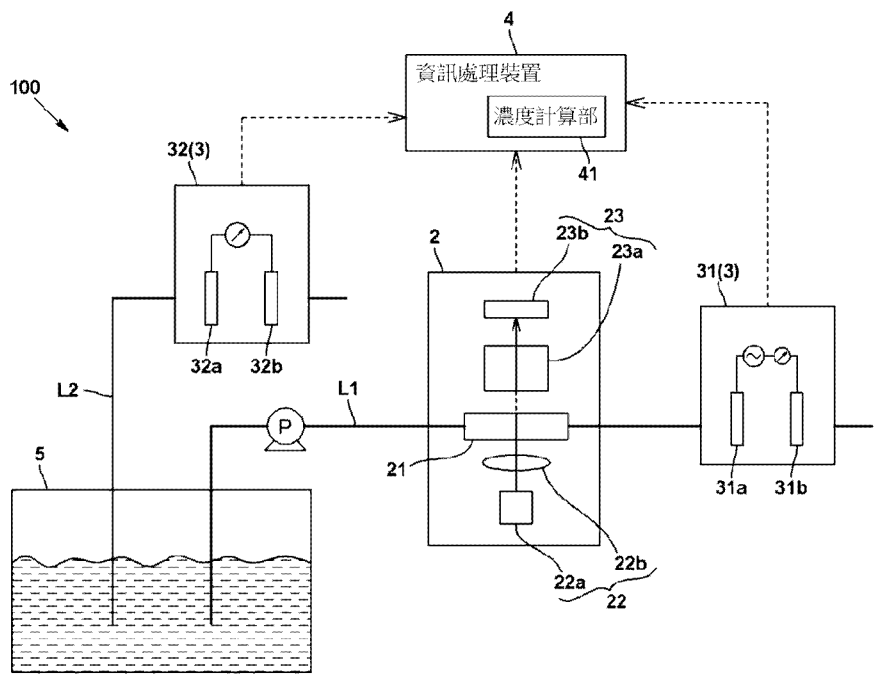
成分濃度測定裝置、成分濃度測定程式以及成分濃度測定方法

(57)摘要

本發明精度良好地求出液體樣本的測定對象成分的濃度，包括：光學測量部 2，測量液體樣本的分光光譜；電化學測量部 3，對液體樣本的特性值進行電化學測量；以及濃度計算部 41，藉由將分光光譜以及特性值設為解釋變數的多變量分析來算出測定對象成分的濃度。

The disclosure obtaining concentration of a target component to be measured of a liquid sample with good accuracy includes: an optical measuring part 2 measuring a spectroscopic spectrum of the liquid sample; an electrochemical measuring part 3 electrochemically measuring a characteristic value of the liquid sample; and a concentration calculating part 41 calculating the concentration of the target component to be measured by multivariate analysis using the spectroscopic spectrum and the characteristic value as an explanatory variable.

指定代表圖：



【圖1】

符號簡單說明：

- 2:光學測量部
- 3:電化學測量部
- 4:資訊處理裝置
- 5:藥液槽
- 21:流通槽
- 22:光照射部
- 22a:光源
- 22b:聚光透鏡
- 23:光檢測部
- 23a:分光器
- 23b:光檢測器
- 31:導電率計
- 31a、31b:電極
- 32:pH 計
- 32a:pH 玻璃電極(作用電極)
- 32b:比較電極
- 41:濃度計算部
- 100:成分濃度測定裝置
- L1:第一樣本流路
- L2:第二樣本流路

【發明摘要】

【中文發明名稱】成分濃度測定裝置、成分濃度測定程式以及成分濃度測定方法

【英文發明名稱】COMPONENT CONCENTRATION MEASURING APPARATUS, COMPONENT CONCENTRATION MEASURING PROGRAM, AND COMPONENT CONCENTRATION MEASURING METHOD

【中文】

本發明精度良好地求出液體樣本的測定對象成分的濃度，包括：光學測量部 2，測量液體樣本的分光光譜；電化學測量部 3，對液體樣本的特性值進行電化學測量；以及濃度計算部 41，藉由將分光光譜以及特性值設為解釋變數的多變量分析來算出測定對象成分的濃度。

【英文】

The disclosure obtaining concentration of a target component to be measured of a liquid sample with good accuracy includes: an optical measuring part 2 measuring a spectroscopic spectrum of the liquid sample; an electrochemical measuring part 3 electrochemically measuring a characteristic value of the liquid sample; and a concentration calculating part 41 calculating the concentration of the target component to be measured by multivariate analysis using the spectroscopic spectrum and the characteristic value as an

explanatory variable.

【指定代表圖】圖1。

【代表圖之符號簡單說明】

2:光學測量部

3:電化學測量部

4:資訊處理裝置

5:藥液槽

21:流通槽

22:光照射部

22a:光源

22b:聚光透鏡

23:光檢測部

23a:分光器

23b:光檢測器

31:導電率計

31a、31b:電極

32:pH計

32a:pH玻璃電極（作用電極）

32b:比較電極

41:濃度計算部

100:成分濃度測定裝置

L1:第一樣本流路

L2:第二樣本流路

【特徵化學式】

無

【發明說明書】

【中文發明名稱】成分濃度測定裝置、成分濃度測定程式以及成分濃度測定方法

【英文發明名稱】COMPONENT CONCENTRATION MEASURING APPARATUS, COMPONENT CONCENTRATION MEASURING PROGRAM, AND COMPONENT CONCENTRATION MEASURING METHOD

【技術領域】

【0001】 本發明是有關於一種對液體樣本的測定對象成分的濃度進行測定的成分濃度測定裝置、成分濃度測定用程式以及成分濃度測定方法。

【先前技術】

【0002】 例如作為對藥液等的液體樣本中所含的測定對象成分的濃度進行測定的方法，如專利文獻 1 所示般，使用有吸收光譜法。該吸收光譜法是對液體樣本照射光以測量光吸收光譜（分光光譜），將根據所述光吸收光譜而求出的吸光度使用預先求出的檢量線而換算為濃度。

【0003】 然而，所述吸收光譜法存在下述問題，即，在原理上機械誤差大。再者，所謂機械誤差，是指在相同機型的裝置間產生的測定值之差。作為產生機械誤差的原因，可列舉裝置間的光源強度的偏差、檢測器靈敏度的偏差、或光學系統的機械精度的

偏差等。而且，在液體樣本中包含多個成分，且該些成分間的吸收光譜有所重疊的情況下，亦難以精度良好地對測定對象成分的濃度進行測定。進而，近年來，有時要求 ppm 級的微量成分的濃度測定，測定對象成分的濃度測定的精度提高備受重視。

[現有技術文獻]

[專利文獻]

【0004】 [專利文獻 1]日本專利特開 2014-126529 號公報

【發明內容】

[發明所欲解決之課題]

【0005】 因此，本發明是為了解決所述問題而完成，其主要課題在於，精度良好地求出液體樣本中所含的測定對象成分的濃度。

[解決課題之手段]

【0006】 即，本發明的成分濃度測定裝置對液體樣本中的測定對象成分的濃度進行測定，所述成分濃度測定裝置的特徵在於包括：光學測量部，測量所述液體樣本的分光光譜；電化學測量部，對所述液體樣本的特性值進行電化學測量；以及濃度計算部，藉由將所述分光光譜以及所述特性值設為解釋變數的多變量分析來算出所述測定對象成分的濃度。

【0007】 根據如此般構成的成分濃度測定裝置，藉由將液體樣本的分光光譜以及液體樣本的特性值設為解釋變數的多變量分析來算出測定對象成分的濃度，因此可精度良好地求出測定對象成分的濃度。

具體而言，除了分光光譜以外，還使用藉由作為在原理上機械誤差小的測定方法的電化學測定而獲得的特性值來作為多變量分析的解釋變數，因此與僅使用吸收光譜法來算出測定對象成分的濃度的情況相比，可降低機械誤差。

而且，由於將以多個測定原理獲得的值（分光光譜以及特性值）作為解釋變數，因此即便在有其他成分的分光光譜重疊於測定對象成分的分光光譜的情況下，亦能精度良好地對測定對象成分的濃度進行測定。

【0008】 而且，為了降低因光源的閃爍或雜散光等造成的漂移（drift）的影響，理想的是，所述濃度計算部以波長來對所述分光光譜進行一次微分或二次微分，將其微分值作為解釋變數來進行多變量分析。

若為此結構，則與使用一個波長時的吸光度的情況相比，可提高測定對象成分的測定精度。再者，在使用一個波長時的吸光度的情況下，僅為一點的數據而非連續函數，因此無法進行微分處理，難以降低因光源的閃爍或雜散光等造成的漂移的影響。

此處，在以波長對分光光譜進行一次微分的情況下，與進行二次微分的情況相比，訊噪（Signal Noise，SN）比變佳。另一方面，在以波長對分光光譜進行二次微分的情況下，與進行一次微分的情況相比，可減少雜訊。可根據是注重 SN 比抑或是注重雜訊，來決定是進行一次微分抑或是進行二次微分。

【0009】 為了進一步提高測定對象成分的測定精度，理想的

是，所述濃度計算部將所述分光光譜中的至少一個以上的波長上的值作為解釋變數來進行多變量分析。

【0010】 作為電化學測量部的具體實施形態，理想的是，所述電化學測量部具有對所述液體樣本的導電率進行測量的導電率計或者對所述液體樣本的 pH 進行測量的 pH 計。該導電率計以及 pH 計在測定原理上機械誤差小，藉由將他們追加為多變量分析的解釋變數，從而與僅使用吸收光譜法來算出測定對象成分的濃度的情況相比，可降低機械誤差。尤其在液體樣本中存在具有導電性的微量成分的情況下，理想的是導電率計，在液體樣本中存在與氫離子（ H^+ ）存在相關的微量成分的情況下，理想的是 pH 計。

【0011】 而且，作為用於進一步提高測定對象成分的測定精度的電化學測量部以及濃度計算部的具體實施形態，理想的是，所述電化學測量部具有對所述液體樣本的導電率進行測量的導電率計以及對所述液體樣本的 pH 進行測量的 pH 計，所述濃度計算部藉由使用以下數式的多變量分析來算出所述測定對象成分的濃度。

【0012】 [數 1]

$$C(\text{濃度}) = \sum (a(\text{係數}) \times Abs(\text{吸光度})) + b(\text{係數}) \times EC(\text{導電率}) + c(\text{係數}) \times pH + R(\text{殘差項})$$

【0013】 在所述液體樣本包含產生導電性的成分及不產生導電

性的成分的情況下，若為所述電化學測量部具有導電率計的結構，則即便在分光光譜中產生導電性的成分與不產生導電性的成分有所重疊，亦可將他們予以分離而測定。具體而言，如圖 3 的 (a) 及圖 3 的 (b) 所示，即便是僅僅依靠分光光譜無法區分的成分（即便是僅僅依靠分光光譜無法對每個成分測定濃度的樣本），藉由增加導電率這一解釋變數，對成分濃度進行解釋的各解釋變數的加權（相當於相對於各解釋變數的濃度回歸係數者）亦會發生變化。由此，即便是吸收光譜重合而無法分離的成分，亦能測定各自的濃度。再者，圖 3 的 (a) 及圖 3 的 (b) 中，曲線表示樣本的吸光度，導電率以及 pH 的圓點表示各自的測定值，柱狀圖表示將各解釋變數對濃度造成的影響的大小數值化者（圖中顯示為「濃度貢獻率」）。

【0014】 而且，在所述液體樣本包含與氫離子存在相關的成分及與氫離子無相關的成分的情況下，若為所述電化學測量部具有 pH 計的結構，則即便在分光光譜中與氫離子存在相關的成分及與氫離子無相關的成分有所重疊，亦能將他們予以分離而測定。具體而言，如圖 3 的 (a) 及圖 3 的 (b) 所示，即便是僅僅依靠分光光譜無法區分的成分（即便是僅僅依靠分光光譜無法對每個成分測定濃度的樣本），藉由增加 pH 這一解釋變數，對成分濃度進行解釋的各解釋變數的加權（相當於相對於各解釋變數的濃度回歸係數者）亦會發生變化。由此，即便是吸收光譜重合而無法分離的成分，亦能測定各自的濃度。

【0015】 而且，本發明的成分濃度測定用程式對液體樣本中所含的測定對象成分的濃度進行測定，所述成分濃度測定用程式的特徵在於包括：光學測量部，測量所述液體樣本的分光光譜；電化學測量部，對所述液體樣本的特性值進行電化學測量；以及濃度計算部，藉由將所述分光光譜以及所述特性值設為解釋變數的多變量分析來算出所述測定對象成分的濃度。

【0016】 進而，本發明的成分濃度測定方法是對液體樣本中所含的測定對象成分的濃度進行測定的方法，所述成分濃度測定方法的特徵在於，測量所述液體樣本的分光光譜，對所述液體樣本的特性值進行電化學測量，藉由將所述分光光譜以及所述特性值設為解釋變數的多變量分析來算出所述測定對象成分的濃度。

[發明的效果]

【0017】 根據本發明，藉由將液體樣本的分光光譜以及液體樣本的特性值設為解釋變數的多變量分析，可精度良好地求出液體樣本的測定對象成分的濃度。

【圖式簡單說明】

【0018】

圖 1 是表示本發明的一實施方式的成分濃度測定裝置的結構的概略圖。

圖 2 的 (a) 是表示使用以往例的檢量線時的機械誤差影響的實驗數據，圖 2 的 (b) 是表示使用本實施例的檢量線時的機械誤差影響的實驗數據。

圖 3 的 (a) 是表示僅使用吸光度時的濃度貢獻率的圖，圖 3 的 (b) 是表示使用吸光度、導電率以及 pH 時的濃度貢獻率的圖。

【實施方式】

【0019】 以下，參照附圖來說明本發明的成分濃度測定裝置的一實施方式。

【0020】 < 裝置結構 >

本實施方式的成分濃度測定裝置 100 例如對半導體製造裝置中所使用的藥液等的液體樣本中所含的測定對象成分的濃度進行測定。該成分濃度測定裝置 100 例如介在於供給所述藥液的藥液配管中而設，對該藥液的測定對象成分的濃度進行測定。再者，使用如此般獲得的濃度來控制藥液的濃度等。再者，作為藥液，為兩成分以上的混合藥液（混合液體樣本），例如包含在溶解時產生導電性的成分、不產生導電性的成分、或與氫離子（ H^+ ）存在相關的成分。

【0021】 具體而言，如圖 1 所示，成分濃度測定裝置 100 包括：光學測量部 2，測量液體樣本的分光光譜；電化學測量部 3，對液體樣本的特性值進行電化學測量；以及資訊處理裝置 4，對自光學測量部 2 以及電化學測量部 3 獲得的測量資訊進行處理。再者，所謂特性值，是指與液體樣本中所含的測定對象成分濃度存在相關的物性值。

【0022】 光學測量部 2 是對液體樣本照射光以測量液體樣本的吸光度的吸光度計。具體而言，光學測量部 2 具有：流通槽（flow

cell) 21，供液體樣本流動；光照射部 22，具有對所述流通槽 21 內的液體樣本照射光的光源 22a 以及聚光透鏡 22b 等；以及光檢測部 23，對透射流通槽 21 的光進行分光並檢測的分光器 23a 以及光檢測器 23b 等。藉由該光檢測部 23，獲得透射光的光吸收光譜（分光光譜）。再者，本實施方式的光吸收光譜為包含根據透射光的光吸收光譜與入射光的光吸收光譜而求出的吸光度光譜的概念。再者，流通槽 21 例如被設於第一樣本流路 L1，所述第一樣本流路 L1 是由連接於半導體製造裝置的藥液槽 5 的藥液配管（未圖示）所形成。

【0023】 本實施方式的電化學測量部 3 包括：導電率計 31，測量液體樣本的導電率（電傳導率）；以及 pH 計 32，測量液體樣本的 pH。

【0024】 具體而言，導電率計 31 對兩個電極 31a、31b 間施加交流電壓，基於流經的電流來測量液體樣本的導電率（電傳導率）。本實施方式的導電率計 31 在設有所述光學測量部 2 的第一樣本流路 L1 中，設於光學測量部 2 的上游側或下游側。再者，導電率計 31 除了交流兩極方式以外，亦可為交流四極方式者，還可為電磁感應方式者。而且，導電率計 31 亦可設於與第一樣本流路 L1 不同的樣本流路中。

【0025】 而且，pH 計 32 基於在 pH 玻璃電極（作用電極）32a 以及比較電極 32b 之間產生的電位差來測量液體樣本的 pH。本實施方式的 pH 計 32 被設於與第一樣本流路 L1 獨立地由連接於藥液

槽 5 的藥液配管（未圖示）所形成的第二樣本流路 L2。再者，pH 計 32 亦可於第一樣本流路 L1 中設於例如光學測量部 2 的上游側或下游側。

【0026】 資訊處理裝置 4 使用由光學測量部 2 所獲得的光吸收光譜（或吸光度光譜）、由導電率計 31 所獲得的導電率與由 pH 計所獲得的 pH 來算出液體樣本的測定對象成分的濃度。再者，資訊處理裝置 4 是具有中央處理單元（Central Processing Unit，CPU）、記憶體、輸入/輸出介面、類比數位（Analog Digital，AD）轉換器、顯示器等輸出部件、鍵盤等輸入部件的電腦。並且，基於保存於記憶體中的成分濃度計算用程式，CPU 以及周邊機器協作而發揮作為濃度計算部 41 的功能。

【0027】 具體而言，濃度計算部 41 藉由將光吸收光譜以及特性值（導電率以及 pH）設為解釋變數的多變量分析來算出測定對象成分的濃度。再者，作為多變量分析，可考慮複回歸分析（多元線性回歸（Multiple Linear Regression，MLR）或間接最小平方法（Indirect Least Squares，ILS）、主成分回歸分析（Principle Component Regression，PCR）、最小平方法（條件最小平方法（Conditional Least Squares，CLS）、部分最小平方法（Partial Least Squares，PLS）（PLS1 或 PLS2））等。

【0028】 此處，濃度計算部 41 對光吸收光譜進行一次微分或二次微分的微分處理，將其微分值作為解釋變數進行多變量分析。而且，濃度計算部 41 將光吸收光譜中的多個波長各自的值作為解

釋變數來進行多變量分析。

【0029】 具體而言，濃度計算部 41 藉由使用以下數式的多變量分析來算出測定對象成分的濃度。

【0030】 [數 2]

$$C(\text{濃度}) = \sum_{i=1}^n \left(a_i (\text{係數}) \times Abs_i (\text{吸光度}) \right) + b (\text{係數}) \times EC (\text{導電率}) + c (\text{係數}) \times pH + R (\text{殘差項})$$
$$= (a_i, b, c, R) \cdot \begin{pmatrix} Abs_i (\text{吸光度}) \\ EC (\text{導電率}) \\ pH \\ R (\text{殘差項}) \end{pmatrix}$$
$$k \cdot S$$

【0031】 此處，Abs_i（吸光度）是對光吸收光譜進行微分處理所得者，為多個波長（λ₁、λ₂、...λ_n）各自的值。

而且，係數 a_i、係數 b、係數 c 分別為相對於波長 λ_i 的濃度回歸係數、相對於導電率的濃度回歸係數、相對於 pH 的濃度回歸係數。再者，濃度回歸係數相當於各解釋變數的權重。

進而，k 為預先求出的檢量線，S 為光學測量部 2 以及電化學測量部 3 的液體樣本的測量數據（實測數據）。此處，檢量線是藉由使用所述數式對測定濃度已知的標準樣本時所獲得的光學測量部 2 以及電化學測量部 3 的測量數據進行多變量分析而求出。

再者，在使用吸光度以及導電率這兩個解釋變數的情況下，只要在所述數 1 中對 pH 的項填入零即可，在使用吸光度以及 pH 這兩個解釋變數的情況下，只要在所述數 1 中對導電率的項填入

零即可。

【0032】 接下來，圖 2 的 (a) 表示使用以往例的檢量線時的機械誤差影響，圖 2 的 (b) 表示使用本實施例的檢量線時的機械誤差影響。圖 2 的 (a) 及圖 2 的 (b) 是使用包含濃度已知的兩成分 (成分 A、成分 B) 的混合液體樣本的實驗數據。

【0033】 以往例的各檢量線是僅使用吸光度計的光吸收光譜而製作，本實施例的各檢量線是使用吸光度計的光吸收光譜、導電率計的導電率與 pH 計的 pH 而製作。「裝置 X」以及「裝置 Y」均示出了適用相同的檢量線時的預測濃度「ppm」。

【0034】 根據圖 2 的 (a) 及圖 2 的 (b) 可知的是，在「裝置 X」、「裝置 Y」中，與使用以往例的各檢量線的情況相比，使用本實施例的複合分析的檢量線時的預測濃度的精度均有所提高。而且，「裝置 X」以及「裝置 Y」之間的機械誤差亦得以消除。

【0035】 <本實施方式的效果>

根據如此般構成的成分濃度測定裝置 100，藉由將液體樣本的光吸收光譜（分光光譜）以及液體樣本的特性值設為解釋變數的多變量分析來算出測定對象成分的濃度，因此可精度良好地求出測定對象成分的濃度。

【0036】 具體而言，除了光吸收光譜（分光光譜）以外，還使用藉由作為在原理上機械誤差小的測定方法的電化學測定而獲得的特性值來作為多變量分析的解釋變數，因此與僅使用吸收光譜法來算出測定對象成分的濃度的情況相比，可降低預測濃度的機

械誤差，從而不論裝置如何，均可精度良好地求出測定對象成分的濃度。

【0037】 而且，由於是將以多個測定原理獲得的值（分光光譜以及特性值）設為解釋變數，因此即便在有其他成分的分光光譜重疊於測定對象成分的分光光譜的情況下，亦能精度良好地對測定對象成分的濃度進行測定。

【0038】 <其他實施方式>

再者，本發明並不限於所述實施方式。

【0039】 例如，作為多變量分析的解釋變數，除了分光光譜以及電化學測定的特性值以外，亦可追加液體樣本的溫度、或者藉由電化學測定以外的測定原理而測定的液體樣本的物性值。

【0040】 而且，作為電化學測定的特性值，亦可使用導電率或 pH 的其中任一者，除了導電率或 pH 以外，亦可追加折射率、黏度、色度、鹼度、酸度、氧化還原電位（Oxidation-Reduction Potential，ORP）、水硬度、濁度、密度、氫離子以外的離子濃度等。除此以外，亦可追加超音波訊號強度、流量或壓力等。

【0041】 進而，所述實施方式中，將對分光光譜進行微分處理而獲得的微分值設為解釋變數來進行多變量分析，但亦可不對分光光譜進行微分處理，而將所述分光光譜作為解釋變數來進行多變量分析。

【0042】 所述實施方式的光學測量部例如是將白色光照射至流通槽 21（樣本），對透射流通槽 21（樣本）的光進行分光並檢測

的方式，但亦可為例如在將白色光照射至流通槽 21（樣本）之前進行分光並將經所述分光的光照射至流通槽 21（樣本）的方式，且為改變照射至流通槽 21（樣本）的波長的方式。

【0043】 所述實施方式的光學測量部 2 為吸光度計，但亦可為對液體樣本的分光光譜進行測量的其他方式者。作為光學測量部 2，例如亦可為紫外/可見分光光度計、紅外分光光度計、傅立葉變換紅外（Fourier Transform Infrared，FTIR）分光光度計、非色散紅外（Non-Dispersive Infrared，NDIR）分光光度計、近紅外（Near Infrared，NIR）分光光度計、電感耦合電漿原子發射光譜儀（Inductively Coupled Plasma-Atomic Emission Spectrometer，ICP-AES）、螢光 X 射線分析裝置、X 射線吸收分析裝置（X 射線吸收精細結構（X-ray Absorption Fine Structure，XAFS））、核磁共振（Nuclear Magnetic Resonance，NMR）裝置、傅立葉變換核磁共振（Fourier Transform-Nuclear Magnetic Resonance，FT-NMR）裝置等。而且，所述實施方式的成分濃度測定裝置為使用一種光學測量部的結構，但亦可設為使用兩種以上的光學測量部的結構。

【0044】 除此以外，本發明並不限於所述實施方式，當然可在不脫離其主旨的範圍進行各種變形。

[產業上的可利用性]

【0045】 根據本發明，可精度良好地求出液體樣本的測定對象成分的濃度。

【符號說明】

【0046】

2:光學測量部

3:電化學測量部

4:資訊處理裝置

5:藥液槽

21:流通槽

22:光照射部

22a:光源

22b:聚光透鏡

23:光檢測部

23a:分光器

23b:光檢測器

31:導電率計

31a、31b:電極

32:pH 計

32a:pH 玻璃電極（作用電極）

32b:比較電極

41:濃度計算部

100:成分濃度測定裝置

L1:第一樣本流路

L2:第二樣本流路

【發明申請專利範圍】

【請求項1】 一種成分濃度測定裝置，對液體樣本中的測定對象成分的濃度進行測定，所述成分濃度測定裝置包括：

光學測量部，測量所述液體樣本的分光光譜；

電化學測量部，對所述液體樣本的特性值進行電化學測量；

以及

濃度計算部，藉由將所述分光光譜以及所述特性值設為解釋變數的多變量分析來算出所述測定對象成分的濃度。

【請求項2】 如請求項 1 所述的成分濃度測定裝置，其中

所述濃度計算部對所述分光光譜進行一次微分，將其微分值作為解釋變數來進行多變量分析。

【請求項3】 如請求項 1 所述的成分濃度測定裝置，其中

所述濃度計算部對所述分光光譜進行二次微分，將其微分值作為解釋變數來進行多變量分析。

【請求項4】 如請求項 1 至請求項 3 中任一項所述的成分濃度測定裝置，其中

所述濃度計算部將所述分光光譜中的至少一個以上的波長上的值作為解釋變數來進行多變量分析。

【請求項5】 如請求項 1 至請求項 4 中任一項所述的成分濃度測定裝置，其中

所述電化學測量部具有對所述液體樣本的導電率進行測量的導電率計或者對所述液體樣本的 pH 進行測量的 pH 計。

【請求項6】 如請求項 1 至請求項 5 中任一項所述的成分濃度測定裝置，其中

所述電化學測量部具有對所述液體樣本的導電率進行測量的導電率計以及對所述液體樣本的 pH 進行測量的 pH 計，

所述濃度計算部藉由使用以下數式的多變量分析來算出所述測定對象成分的濃度。

$$C(\text{濃度}) = \sum (a(\text{係數}) \times Abs(\text{吸光度})) + b(\text{係數}) \times EC(\text{導電率}) + c(\text{係數}) \times pH + R(\text{殘差項})$$

【請求項7】 如請求項 1 至請求項 6 中任一項所述的成分濃度測定裝置，其中

所述液體樣本包含產生導電性的成分及不產生導電性的成分。

【請求項8】 如請求項 1 至請求項 7 中任一項所述的成分濃度測定裝置，其中

所述液體樣本包含與氫離子存在相關的成分及與氫離子無相關的成分。

【請求項9】 一種成分濃度測定用程式，對液體樣本中的測定對象成分的濃度進行測定，所述成分濃度測定用程式包括：

光學測量部，測量所述液體樣本的分光光譜；

電化學測量部，對所述液體樣本的特性值進行電化學測量；

以及

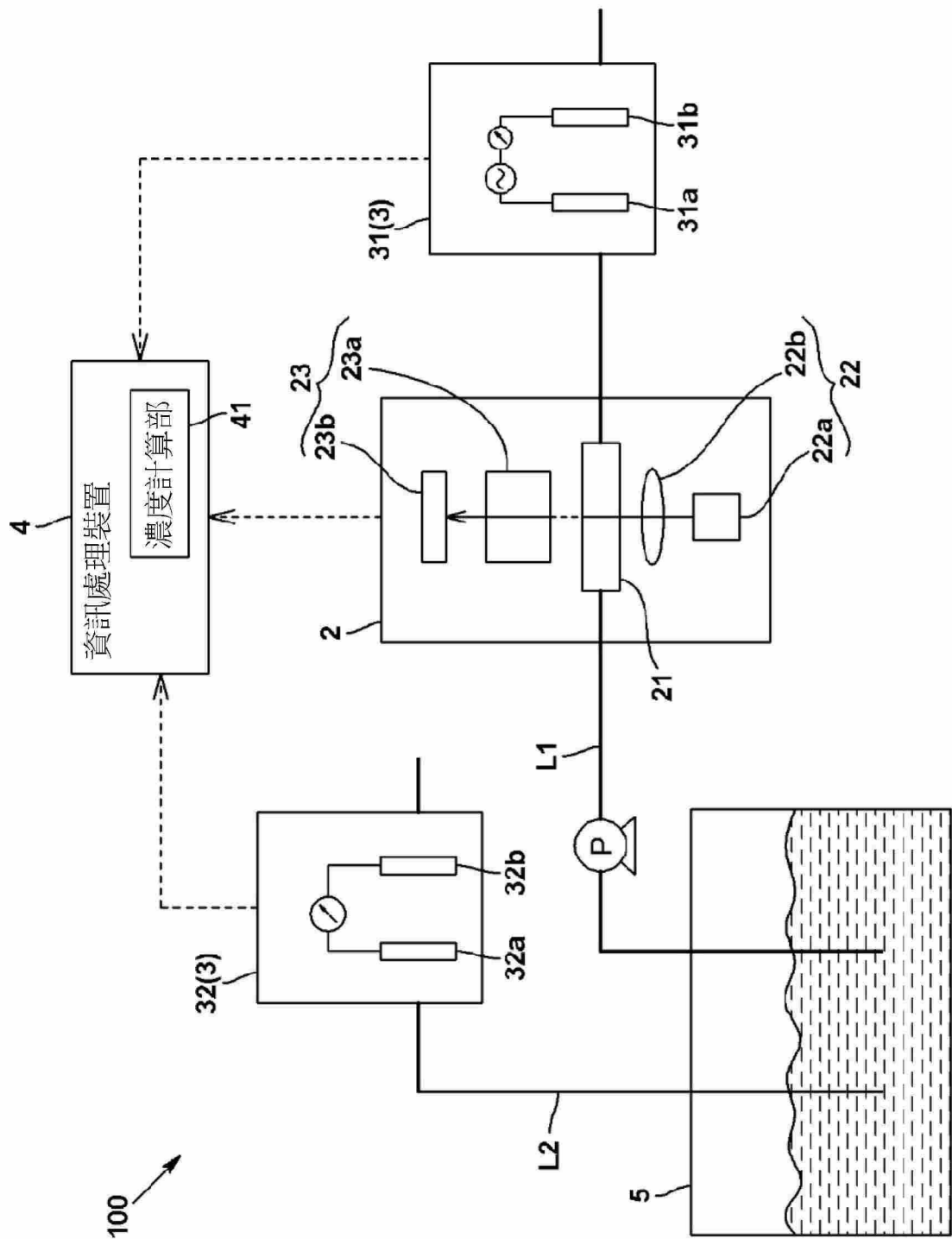
濃度計算部，藉由將所述分光光譜以及所述特性值設為解釋變數的多變量分析來算出所述測定對象成分的濃度。

【請求項10】 一種成分濃度測定方法，是對液體樣本中的測定對象成分的濃度進行測定的方法，其中

測量所述液體樣本的分光光譜，

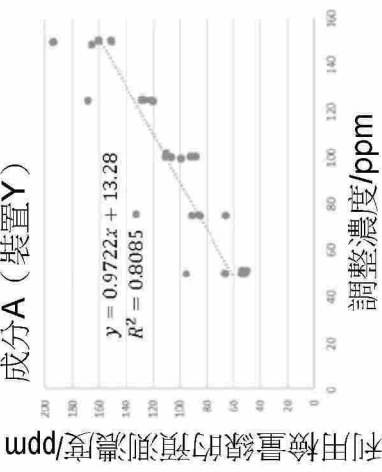
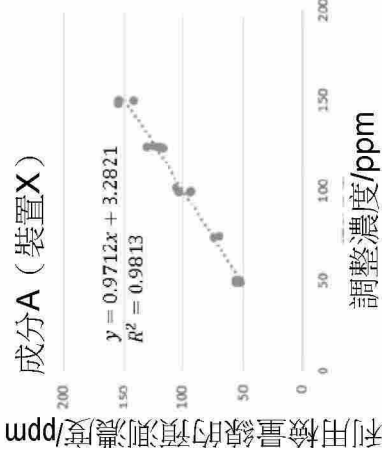
對所述液體樣本的特性值進行電化學測量，

藉由將所述分光光譜以及所述特性值設為解釋變數的多變量分析來算出所述測定對象成分的濃度。

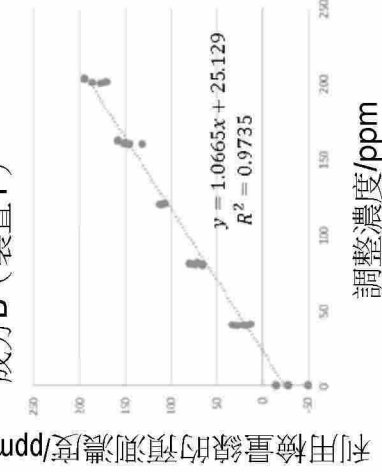
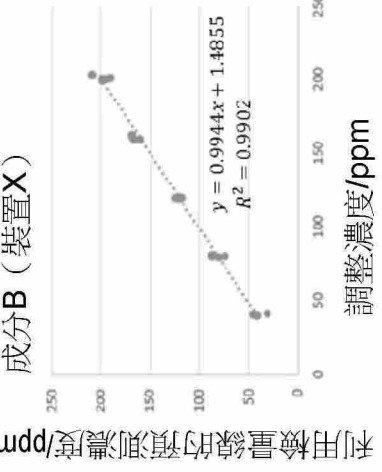
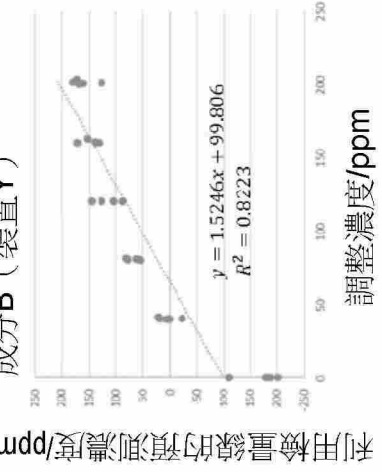
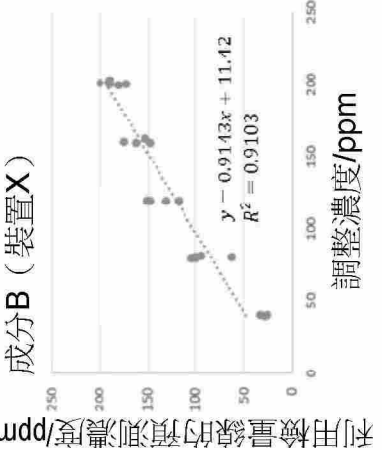
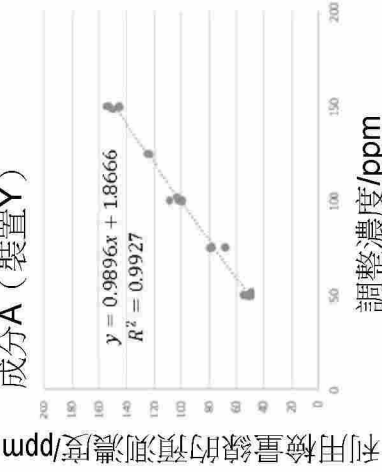
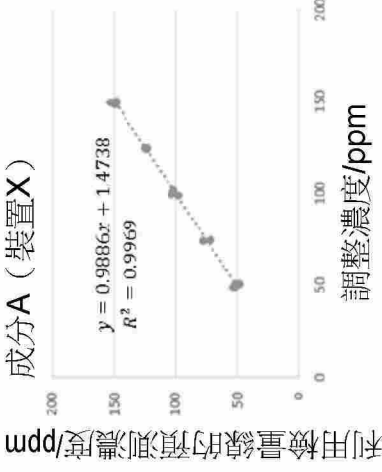


【圖1】

(a)以往例



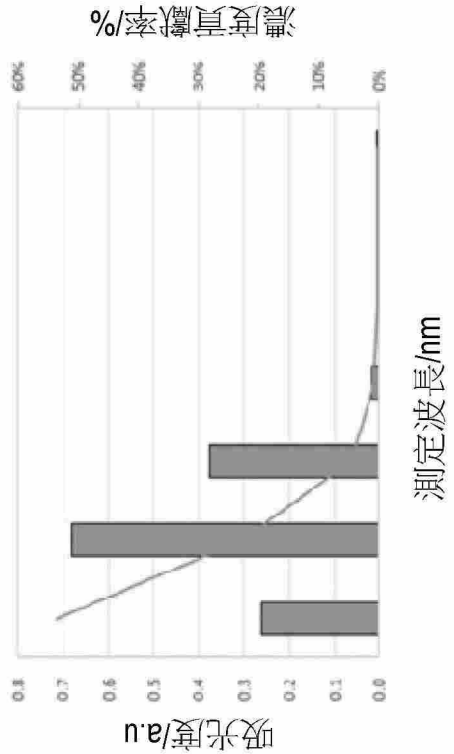
(b)本實施例



【圖2】

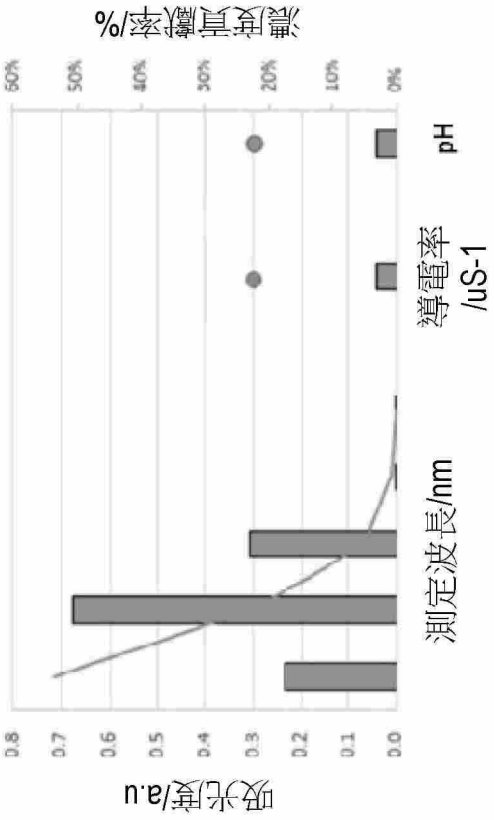
(a)僅使用吸光度的情況

各測定波長對成分A的濃度的貢獻率

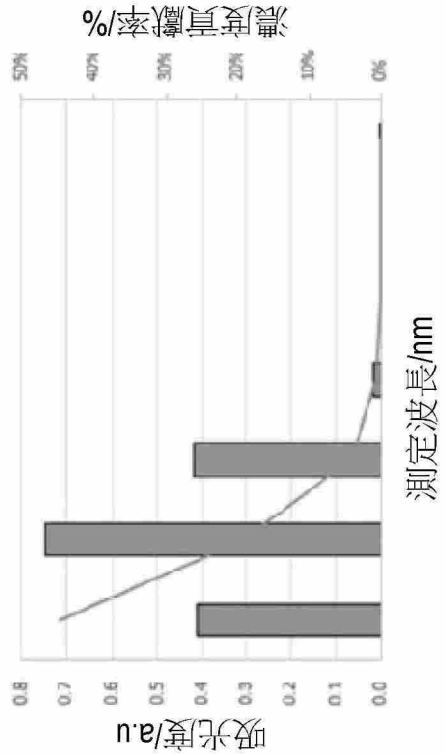


(b)使用吸光度、導電率以及pH的情況

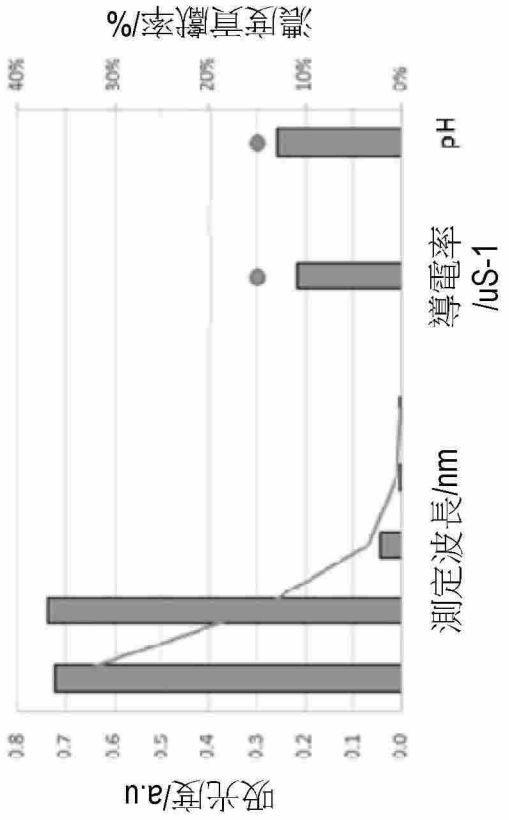
各測定波長對成分A的濃度的貢獻率



各測定波長對成分B的濃度的貢獻率



各測定波長對成分B的濃度的貢獻率



【圖3】