

## レーザー誘起ブレイクダウン分光を使った有機化合物の識別

### Discrimination of organic compound using laser-induced breakdown spectroscopy

<sup>1</sup>倉田孝男 <sup>1</sup>伊澤淳 <sup>3</sup>堀澤秀行 <sup>2</sup>横澤剛 <sup>1</sup>松永易 <sup>4</sup>山口滋

株式会社 IHI<sup>1</sup> 株式会社 INC エンジニアリング<sup>2</sup> 東海大学工学部航空宇宙学科<sup>3</sup> 東海大学理学部物理学科<sup>4</sup>

<sup>1</sup>T.Kurata, <sup>1</sup>Jun Izawa, <sup>2</sup>T.Yokozawa, <sup>3</sup>H.Horisawa, <sup>1</sup>Y.Matsunaga, <sup>4</sup>S.Yamaguchi

IHI corporation<sup>1</sup> INC Engineering Co.,Ltd<sup>2</sup>

Department of Aeronautics and Astronautics, Tokai University<sup>3</sup> Department of Physics Tokai University<sup>4</sup>

**Abstract:** We have investigated discrimination of organic compound using laser-induced breakdown spectroscopy. It was known the LIBS peak ratios allow classification of different organic compounds. We discussed, to improve precision of discrimination, partial pressure of each chemical species in plasma and PLS-DA method.

#### 1. はじめに

レーザー誘起ブレイクダウン分光法（以下 LIBS とする）は、対象試料にパルスのレーザー光を照射し、レーザー光によってプラズマ化され、高エネルギー状態に励起された分解物が元のエネルギー状態に戻る際に放射される光を測定することで、物質の識別に利用される。LIBS の発光は、試料の構成要素である元素による輝線が主のため、ほとんど同じ元素で構成されている有機化合物の識別には向いていなかった。構成元素からの発光のピーク比を元に識別する技術は発表されているが、測定条件の違いなどにより、プラズマの条件（温度など）が変わり、測定値がばらつくために確実な識別は難しかった。

本研究では、LIBS による有機化合物の識別の精度を上げるために、プラズマ温度を推定してシミュレーションで求めた組成比と比較する方法と、PLS-DA（ケモメトリックスの手法）を使った方法を検討した。

#### 2. 試験方法

実験装置の概略図を Fig.1 に示す。測定のターゲットは、ナイロン6、ウレタンゴム、ポリエチレン、ポリスチレンの4種の有機化合物を選び、小型フェムト秒レーザー（パルス幅150fs、中心波長800nm）をターゲットに照射した。レーザー光はレンズを使用してφ0.1mm程度に集光して、ターゲット表面でブレイクダウンを発生させた。ターゲットはダメージを一点に集中させないために回転させた。ブレイクダウンで発生した光を両凸レンズで集光し、光ファイバで分光器に導いた。

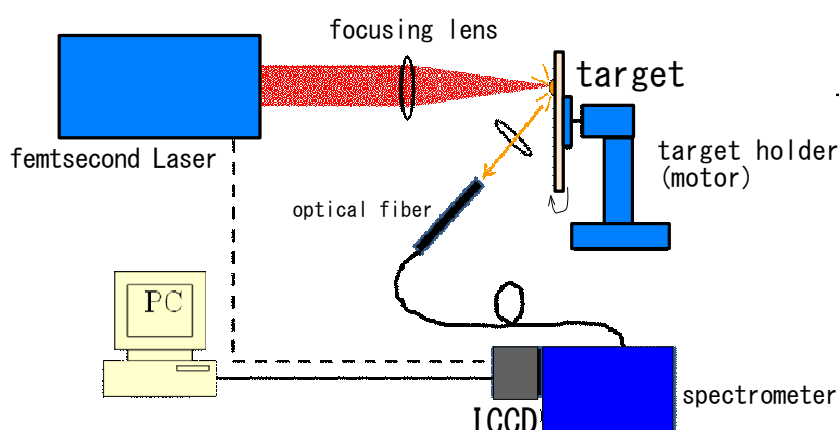


Fig.1 Experimental setup

### 3. 結果

Fig.2 に測定した 4 種のターゲットの LIBS スペクトルを示す。測定スペクトルからプラズマの温度を推定し、次に、局所熱平衡を仮定してシミュレーションで求めたプラズマ中の化学種の組成比と LIBS スペクトルで対応する化学種のピーク比とを比較した。Fig.3 はシミュレーションで求めた C2/CN と LIBS スペクトルから計測したピーク比 C2(486nm)/CN(388nm) の関係をプロットしたものである。ターゲットごとに 5 回計測した実測値と、それらの平均値を同時にプロットした。個々の点はばらついているものの、平均値はシミュレーションの組成比と比例関係にあることが分かる。

Fig.4 は、ピーク比を C2/CN の他に、C/CN、H/CN など複数使用して、ケモトリックスの一手法である PLS-DA を用いてウレタンの識別モデルの例である。測定したウレタンの 5 つのデータ中全てがウレタンと識別された。Fig.3 では、ピーク比の大きさのばらつき範囲は、ウレタンはナイロンと重なっており、識別はできないが、PLS-DA を用いれば、識別の可能性があることが分かった。

### 4. まとめと課題

フェムト秒レーザーを使って有機化合物の LIBS スペクトルを採取し、有機化合物の識別の可能性を検討した。複数のピーク比を用いた PLS-DA を使えば識別可能性があることが分かった。個々の測定プロットではばらついているものの、平均値を見ればシミュレーションによる組成比と実測ピーク比が対応していることから、プラズマ温度で補正すれば識別精度向上につながると考えられる。

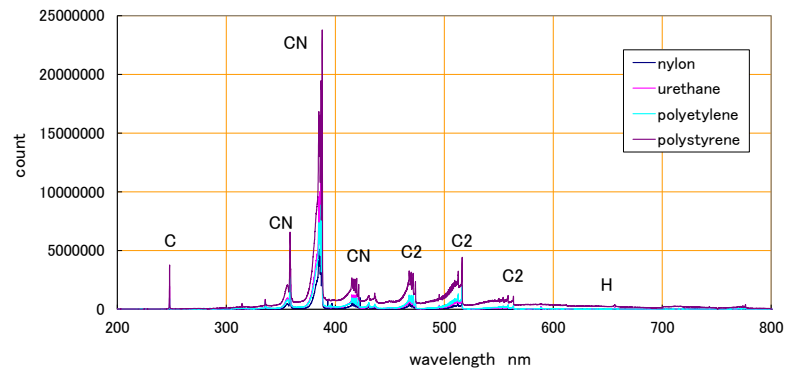


Fig.2 LIBS Spectra of various organic compounds

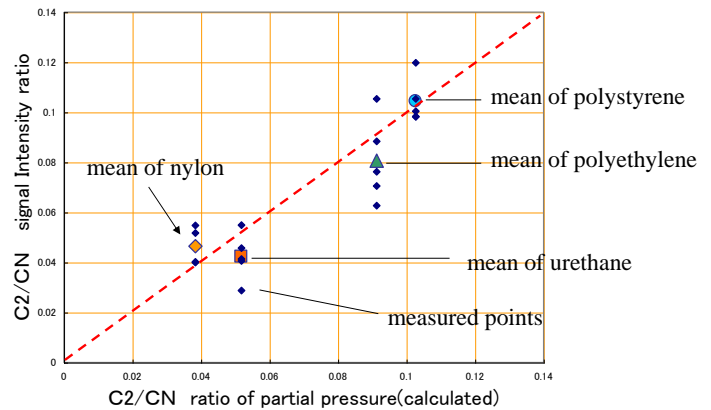


Fig.3 Plots of signal ratio vs ratio of partial pressure

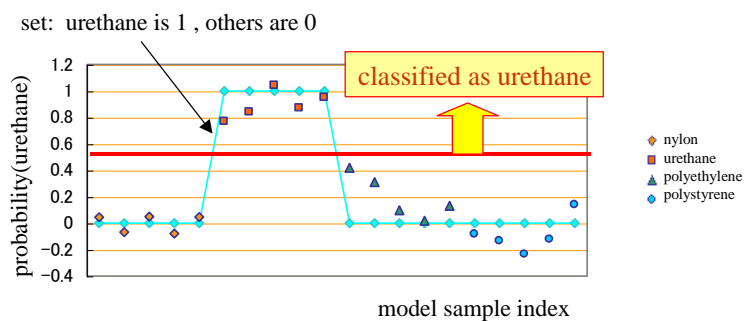


Fig.4 PLS-DA model