

学士論文

デュアル EO コム分光法による自動補間法における 三角波電圧波形の最適化

Optimization of triangle voltage waveforms in the automatic interpolation method
by dual-EO-comb spectroscopy

東京電機大学 工学部 電子システム工学科

光応用工学研究室

21EH093 光岡 佑馬

指導教員 西川 正 教授

目次

1. 序論	3
1.1 研究背景.....	3
1.1.1 呼気分析.....	3
1.1.2 分子分光法	3
1.1.3 光周波数コム.....	3
1.1.4 デュアルコム分光法	3
1.1.5 自動補間法	4
1.2 目的.....	4
2. 理論	5
2.1 光周波数コム	5
2.2 電気光学コム (EO コム)	6
2.2.1 EO コムの生成	6
2.2.2 IM と PM の役割	7
2.3 光周波数コムを用いた分子分光法	7
2.4 デュアル EO コム分光法	8
2.4.1 デュアルコム分光法	8
2.4.2 デュアル EO コム分光法.....	9
2.4.3 音響光学変調器 (AOM)	10
2.5 自動補間.....	11
2.5.1 自動補間法	11
2.5.2 マイクロ波領域における自動補間方法.....	12
3. 先行研究.....	13
3.1 自動補間法を用いたデュアル EO コム分光系	13
3.2 データ取得方法	14
3.3 Mathematica を用いたデータ処理	16
3.4 除算による吸収線スペクトルの取得	17
3.5 補間前後の EO コムの測定結果	18
3.6 まとめ	21
4. 提案手法	22
4.1 三角波電圧波形の最適化.....	22
4.2 各パラメータの決定	23
4.2.1 波長計を用いた周波数シフト量の測定	23
4.2.2 三角波の周期、周波数、トリガディレイの算出・決定.....	24

5. 提案手法による測定結果	26
5.1 提案手法による RF コムの測定	26
5.2 光領域変換後の EO コムの測定	28
5.3 吸収線スペクトルの測定	29
6. 吸収線スペクトルのベースライン補正	30
6.1 Fityk を用いたベースライン補正.....	31
6.1.1 提案手法.....	31
6.1.2 提案手法による測定結果	33
6.1.3 測定結果による考察	34
6.2 Curve Fitting (Igor Pro)を用いたベースライン補正.....	35
6.2.1 提案手法.....	35
6.2.2 提案手法による測定結果	37
6.2.3 測定結果による考察	38
6.2.4 今後の展望.....	40
7. 結論	43
7.1 まとめ	43
7.2 今後の展望	44
参考文献	45
謝辞	46

1. 序論

1.1 研究背景

1.1.1 呼気分析

人の呼気中には、約 1,000 種類の分子が含まれている。一方で、疾患をもった患者の呼気中からは、バイオマーカーと呼ばれるその病気の指針となる分子が、健康な人より多く含まれている。そのため疾患をもった患者の呼気中の分子を検出し、バイオマーカーを特定することで、疾患を特定することができる。これを呼気分析と呼び、血液検査など痛みを伴わない非侵襲的な病気の診断が可能になる。

1.1.2 分子分光法

分子には特定の周波数の光を吸収するという性質がある。この性質から物質に光を照射・透過させ、その透過光スペクトルから物質中に含まれる分子を特定することができる。これを分子分光法と呼び、呼気分析によるバイオマーカーの特定への応用などに期待されている。

1.1.3 光周波数コム

輝線スペクトルが周波数軸上に等間隔に並んだレーザ光を光周波数コムと呼ぶ。本研究では 1 つの連続発振半導体レーザと複数の電気光学変調器から生成される電気光学コム(EO コム)を用いている。また、この光周波数コムを分子分光法に応用することで、複数の分子を検出することができる。しかし、本研究で用いている光周波数コムの周波数領域は約 195 THz と高周波なため、光周波数コムを用いた計測を行う場合、後述するデュアルコム分光法によって周波数領域を下げる必要がある。

1.1.4 デュアルコム分光法

モード間隔のわずかに異なる 2 つの光周波数コムを用い、光領域にある 2 つの光周波数コムのうなりをビート信号として分子分光法に応用する方法をデュアルコム分光法と呼ぶ。これにより周波数領域をマイクロ波領域までダウンコンバートでき、高速かつ高分解能な測定を可能とすることができる。

1.1.5 自動補間法

本研究で用いている光周波数コムのモード間隔内には光強度がないため、モード間隔内に分子の吸収線が存在すると計測が行えない。そのため光周波数コムを用いた分子分光法は低分解能といった問題があった。そこで、光周波数コムのモード間の補間を自動で行うことで高分解能化する方法を自動補間法と呼ぶ。これは強度のないモード間隔内のすき間を自動で埋めるイメージである。

本研究では三角波を変調信号として用いて、レーザの光周波数シフトを行うことで自動補間法を実現している。

1.2 目的

本研究では、自動補間法を用いたデュアル EO コム分光系による分子分光法を行い、分子の吸収線を取得する。また、自動補間法として三角波電圧波形の信号によってレーザの周波数を周期的に制御することで、自動的に周波数シフトを行う。

先行研究では、データ取得時間を三角波電圧波形の半周期と一致させ、周波数シフトを行っていたが、トリガ信号によっては三角波の折り返しがデータ取得のタイミングに入りやすく、正常に補間されたデータを取得することが困難であった。

そこで本研究では、データ取得時間は変えず、三角波の周期及び電圧値を拡大し、トリガディレイを最適化することで、トリガの最適化を行い、トリガ信号によるデータ取得のタイミングが多少ずれても、三角波の折り返しが入らないようにし、正常に補間されたデータを容易に取得可能とする目的とする。

2. 理論

2.1 光周波数コム

光周波数コムとは、輝線スペクトルと呼ばれるスペクトル成分が周波数軸上に等間隔に並んだレーザ光である。また、時間領域ではパルス幅が数百フェムト秒～数ピコ秒ととても狭く、超短パルスレーザともいわれる。(図 1)

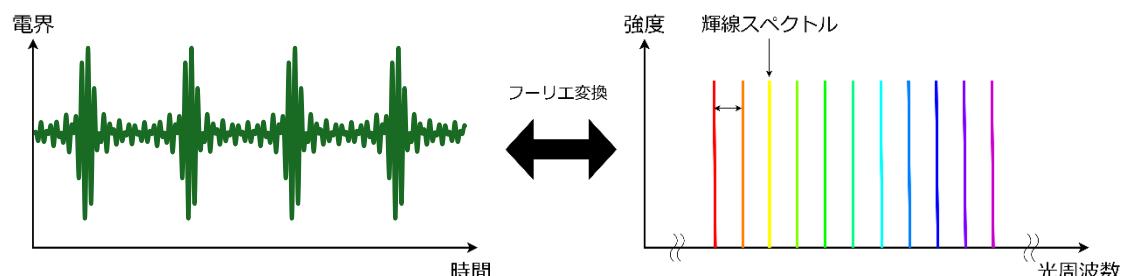


図 1 光周波数コム

ここで、光周波数コムとの比較用として単一波長レーザ及び二波長レーザを例として示す。(図 2)

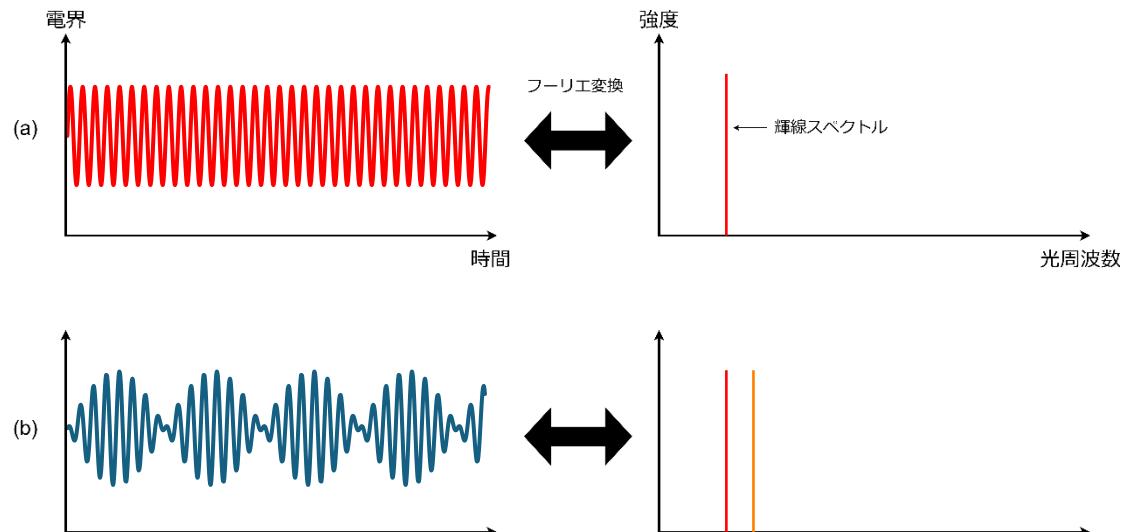


図 2 (a) 単一波長レーザ (b) 二波長レーザ

図 2(a)の单一波長レーザの場合、時間領域では単一の正弦波が検出される。したがって時間領域とフーリエ変換の関係にある周波数領域では、正弦波の波長成分の光周波数に対応した輝線スペクトルが検出される。

一方で、図 2(b)の二波長レーザの場合、異なる 2 つの波長成分が存在するので、時間領域ではこの 2 つの光ビート(うなり)が検出され、周波数領域ではそれぞれの波長成分の光周波数に対応した 2 つの輝線スペクトルが検出される。

光周波数コムの場合では、これら 2 種類のレーザとは違い、異なる波長のレーザが無数に存在している。これにより、無数の波長のうなりの強め合う点がとても狭くなるので、時間領域では図 1(左)のように超短パルス列が検出できる。周波数領域では、無数の異なる波長成分の光周波数に対応した輝線スペクトルが、図 1(右)のように等間隔に並んで検出できる。

これにより、光周波数コムは広い帯域において光強度を持っていることから、分子分光法により光周波数コムを物質に照射・透過することで複数の分子を検出することができる。

2.2 電気光学コム (EO コム)

2.2.1 EO コムの生成

1 つの連続発振半導体レーザ(Continuous-Wave-Laser)と、複数の電気光学変調器(Electro-Optic-Modulator)から生成される光周波数コムを電気光学コム(EO コム)と呼ぶ。本研究では、EOM として 1 つの強度変調器(Intensity-Modulator)と 2 つの位相変調器(Phase-Modulator)を用いて、EO コムを生成している。(図 3)

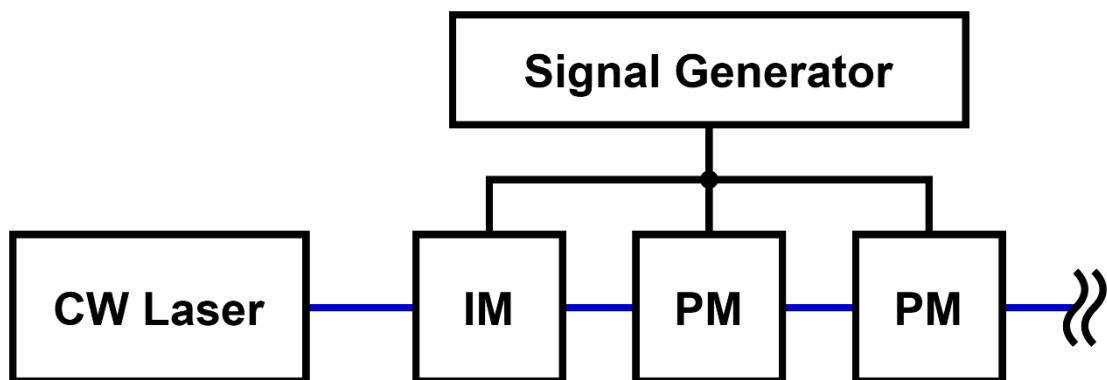


図 3 EO コムの生成

図 3 のように、本研究では信号発生器(Signal-Generator)を用いて EOM を駆動している。また、隣り合う輝線スペクトル同士の周波数間隔(モード間隔)はこの信号発生器から印加される周波数と一致する。

2.2.2 IM と PM の役割

「2.2.1 EO コム」で記した通り、本研究では EOM として強度変調器(IM)と位相変調器(PM)を用いて、EO コムを生成している。過程としては、まずシードレーザから出射された光が IM を通り、2 台の PM を通っている。このシードレーザからは図 2(a)(左)のように強度が一定で单一の周波数の光が出射されている。

IM を通すことで光スペクトル強度を調整し、PM を通すことで側波帯を生成し、光スペクトルの本数を増やしている。

光に PM を通すと、光の位相を時間的に連続で変化させることで、2.1 で記した無数の異なる波長の光の重ね合わせとみなすことができる。この時、時間とともに周波数が増加するアップチャープと、時間とともに周波数が減少するダウンチャープが発生する。この 2 つのチャープ信号が混合すると、EO コムの光スペクトル強度が一定でなくなる。そこで、IM によってダウンチャープをカットし、アップチャープのみを残すことでチャープ信号の混合がなくなり、PM を通った後で EO コムの光スペクトル強度が一定になる。

2.3 光周波数コムを用いた分子分光法

「1.1.2 分子分光法」で記した通り、分子には特定の周波数の光を吸収するという性質がある。そこで、光周波数コムを物質に照射することで、分子が吸収した周波数成分の光強度が低くなるので、この透過光スペクトルから、物質を構成している分子を特定することができる。また、分子の濃度が高ければ高いほど、透過率は低くなる。(図 4)

しかし、光周波数コムの周波数領域は約 195 THz と高周波であり、測定器の応答速度が追いつかないため、周波数領域を下げる必要がある。(2.4 で記す。)

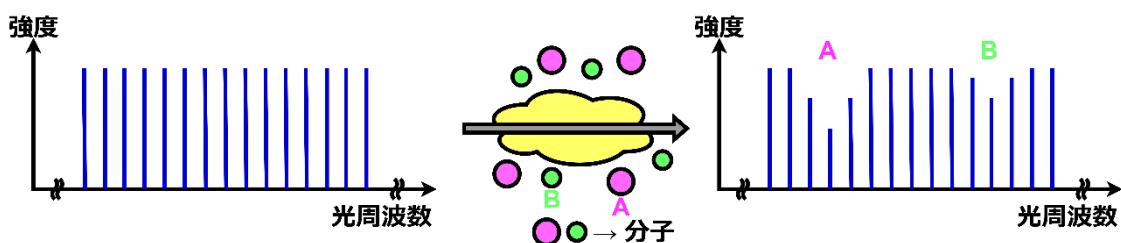


図 4 光周波数コムを用いた分子分光法

2.4 デュアル EO コム分光法

2.4.1 デュアルコム分光法

モード間隔のわずかに異なる2つの光周波数コムを合波し、光領域にある2つの光周波数コムにおける周波数の近いスペクトル同士でうなりをとることで、同じ光周波数コムの形のままマイクロ波領域にダウンコンバートすることができる。この測定方法をデュアルコム分光法と呼び、検出される信号を RF コム(Radio-Frequency)と呼ぶ。(図 5)

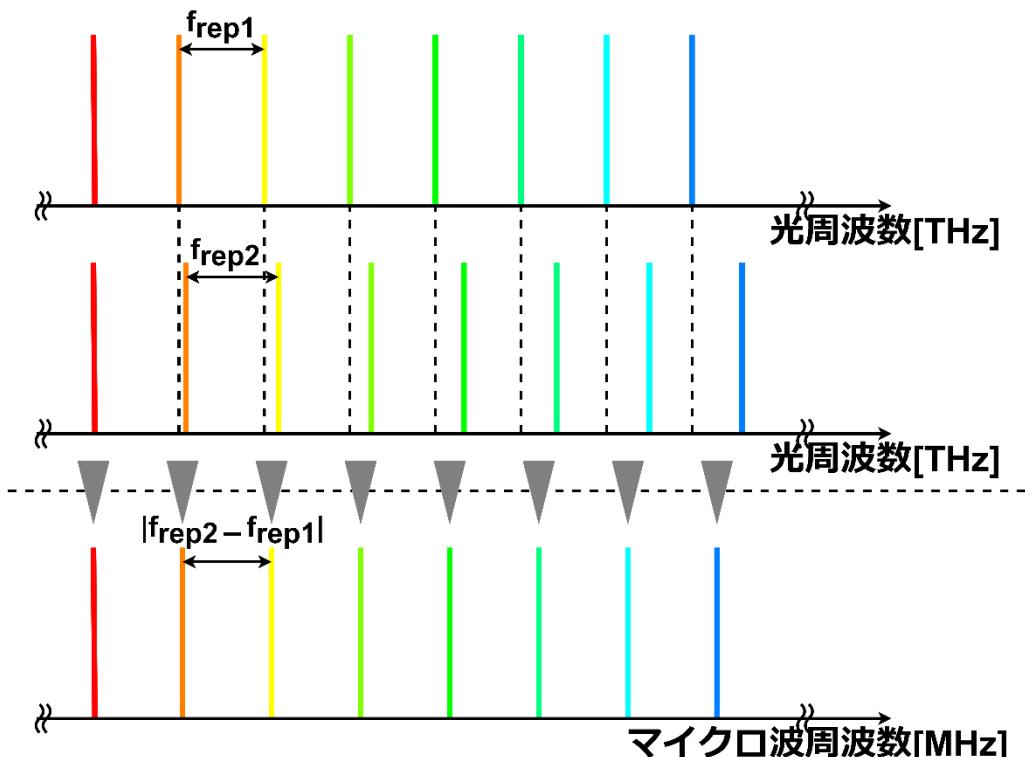


図 5 デュアルコム分光法の原理

図 5 では、2 つの光周波数コムのモード間隔をそれぞれ f_{rep1} と f_{rep2} としている。これにより、2 つの光周波数コムのモードの周波数差は $|f_{rep2} - f_{rep1}|$ 間隔で徐々に広がっていく。そのためマイクロ波領域において RF コムのモード間隔は $|f_{rep2} - f_{rep1}|$ となり、2 つの光周波数コムのうなりに等しくなる。

一般に光のスペクトル測定方法として、回折格子を用いて周波数毎に光を分けてから強度をする方法がある。しかしこの測定方法は回折格子の分解能に依存してしまい、高分解能な測定を行うことができない。また周波数毎に光を分けて強度を測定するため、測定速度も遅くなってしまうといった問題がある。しかしデュアルコム分光法の場合、回折格子を用いていないため、高速かつ高分解能な測定を可能としている。

2.4.2 デュアル EO コム分光法

「2.4.1 デュアルコム分光法」で記したデュアルコム分光法において合波する 2 つの光周波数コムを、「2.2 電気光学コム(EO コム)」で記した EO コムを用いて行う分光法をデュアル EO コム分光法と呼ぶ。本研究では、1 つのシードレーザを 1:1 カプラで 2 分岐させ、それぞれで EO コムを生成した後、合波することでデュアル EO コム分光法を実現している。この方法は 1 つの光源からデュアル EO コム分光法を実現しているため、複雑な位相同期が不要となり、測定を容易としている。(図 6)

また、本研究では図 6 のように音響光学変調器(Acousto-Optic-Modulator)を用いて、片側の光周波数コムの光周波数をシフトしている。(2.4.3 で記す。)

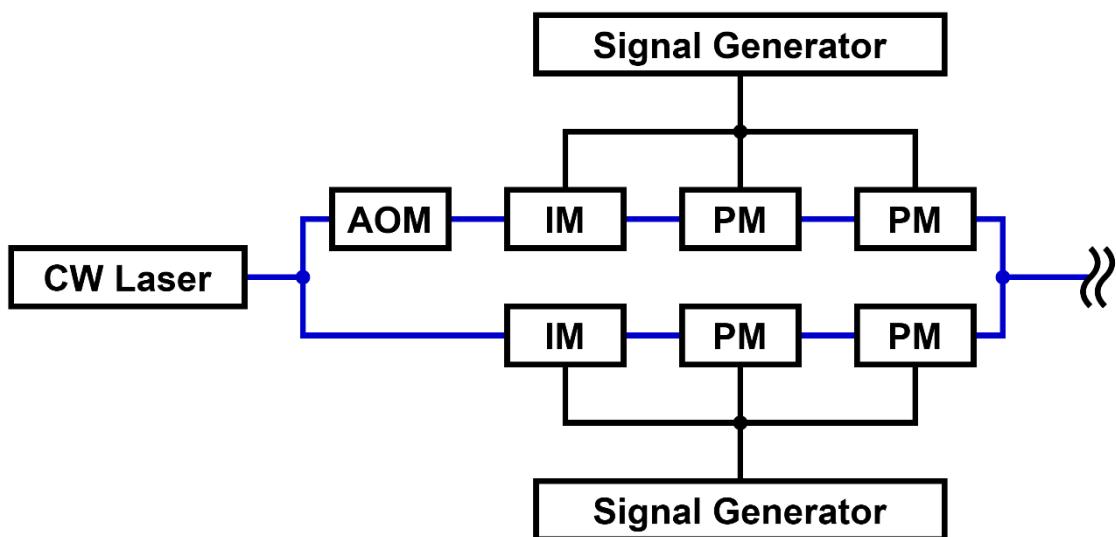


図 6 デュアル EO コム分光法の実現

2.4.3 音響光学変調器 (AOM)

「2.4.2 デュアル EO コム分光法」で記した通り、本研究では 1 つのシードレーザを 2 分岐させ、それぞれで EO コムを生成している。同じ光源を用いているため、複雑な位相同期が不要な反面、2 つの EO コムの中心周波数は一致する。そのため 2 つの EO コムを合波し、うなりをとると、中心周波数の周波数差は 0 となり、両隣の周波数差が Δf , $2\Delta f$, $3\Delta f$...と同じになってしまふため、マイクロ波領域で信号が混合してしまう。

そこで本研究では、音響光学変調器(AOM)を用いて 2 つの EO コムのうち、片側の EO コム全体を f_{AOM} だけ周波数シフトすることで、低周波側と高周波側で信号を区別し、マイクロ波領域で信号が混合しないようにしている。(図 7)

また、このマイクロ波領域における RF コムスペクトルの中心周波数は、AOM を駆動する周波数のみで決まるため、マイクロ波領域の中心周波数は f_{AOM} となる。

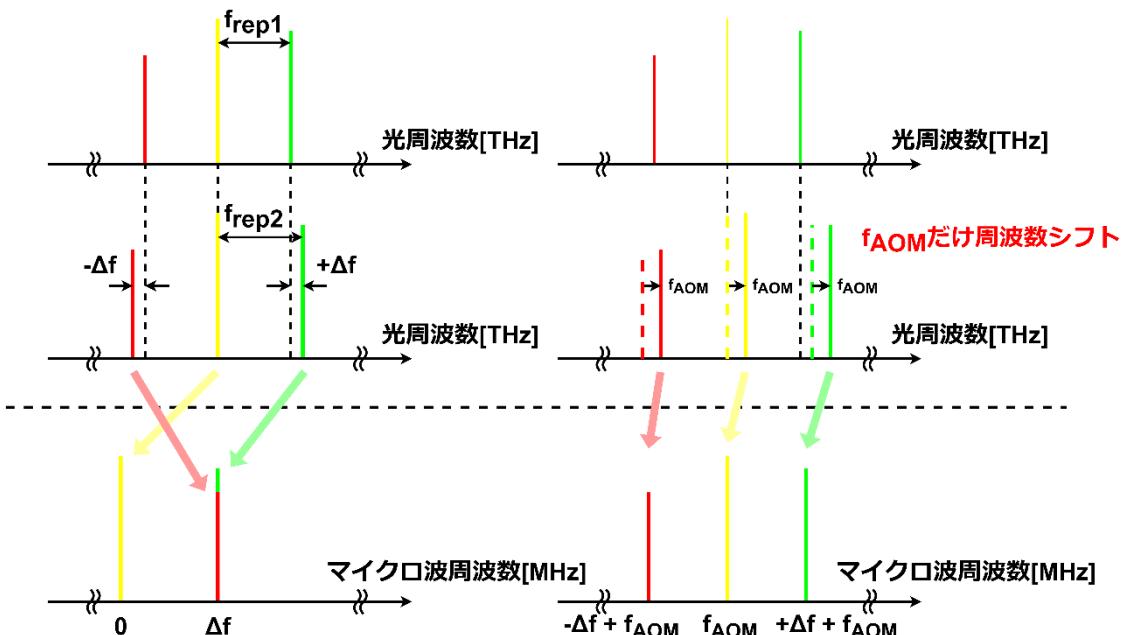


図 7 AOM による周波数シフトの原理

2.5 自動補間

2.5.1 自動補間法

「2.2 電気光学コム(EO コム)」で記した通り、本研究では信号発生器を用いて EOM を駆動しており、EO コムのモード間隔はこの信号発生器から印加される周波数と一致する。後述で詳しく説明するが、本研究でのモード間隔は 25 GHz としている。モード間隔内には光強度がないため、モード間隔内に分子の吸収線が存在すると計測が行えない。またモード間隔を狭くすると帯域が狭くなり、複数の分子の検出が行えないため、光周波数コムによる分子分光法は低分解能であるといった問題があった。

そこで、周波数シフトを行い、EO コムのモード間の補間を自動で行うことで高分解能化する方法を自動補間法と呼ぶ。(図 8)

本研究では自動補間法として、シードレーザの周波数を電気信号によって周期的に制御することで 25 GHz の周波数シフトを行っている。

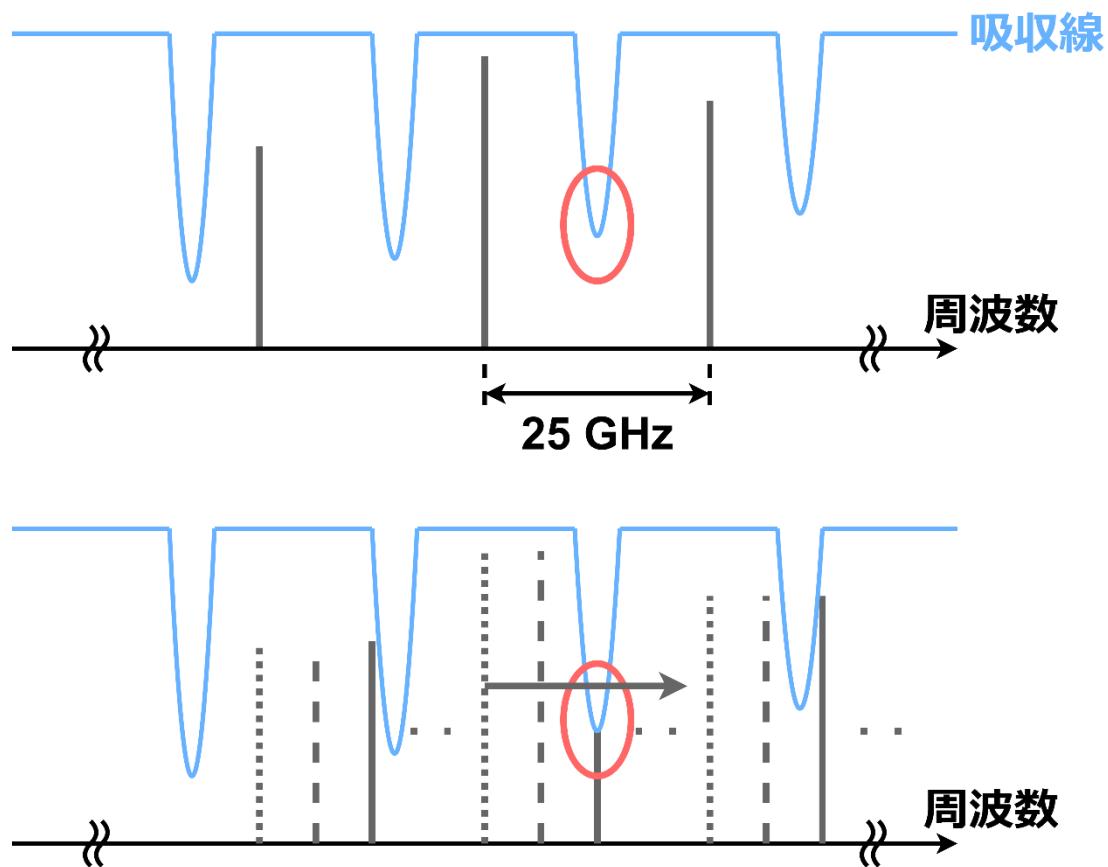


図 8 自動補間法

2.5.2 マイクロ波領域における自動補間方法

「2.4.3 音響光学変調器(AOM)」で記した通り、マイクロ波領域におけるスペクトルの中心周波数は、AOM を駆動する周波数 f_{AOM} のみで決まるため、シードレーザの周波数シフトのみではマイクロ波領域の周波数シフトは行えない。しかし、実際に検出する信号はマイクロ波領域の RF コムなので、光領域だけでなく、マイクロ波領域でも周波数シフトを行う必要がある。そこで光領域とマイクロ波領域を同期させ、周波数シフトを行うことで、光領域における 25 GHz の補間された信号を、マイクロ波領域に正確に変換することができる。(図 9)

本研究では、レーザと AOM の周波数を同期することで周波数シフトを行うことを可能としている。

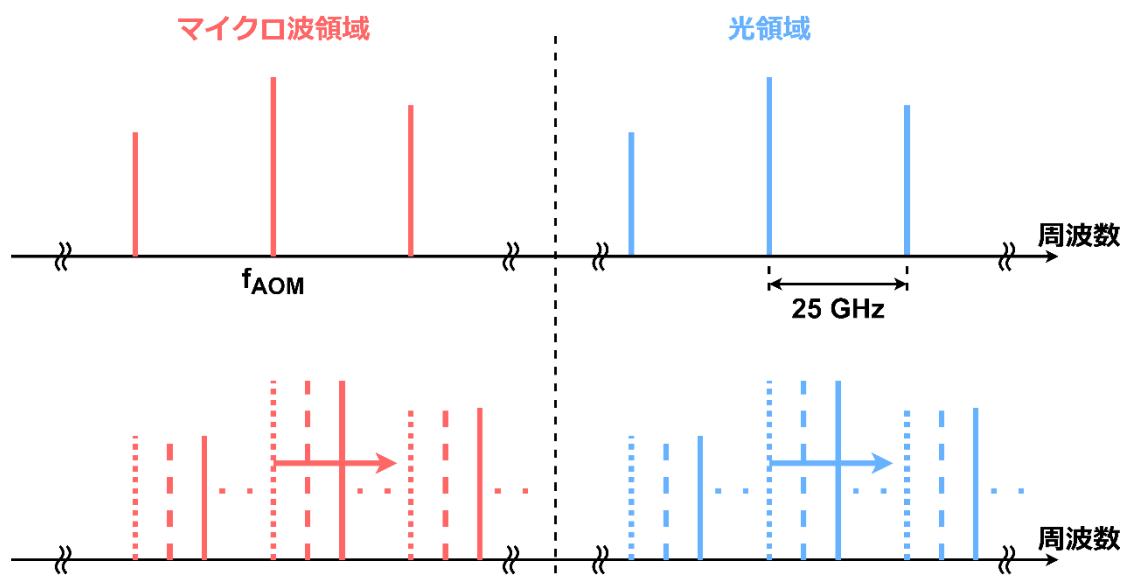


図 9 光領域とマイクロ波領域の同期シフト

3. 先行研究

3.1 自動補間法を用いたデュアル EO コム分光系

先行研究では、シードレーザとして 1 台の分布帰還型レーザ(Distributed Feedback Laser)を用いている。また、この DFB レーザの出力電流は、レーザドライバ(Laser Drive)によって制御している。しかし DFB レーザの中心波長は、温度変化に依存してしまうので、温度調節器(Temperature Controller)によって温度を一定に保った後、99:1 カプラで分岐させ、1 の方を波長計(Wavelength Meter)に入射させることで DFB レーザの中心波長をリアルタイム観測できるようにしている。(図 10)

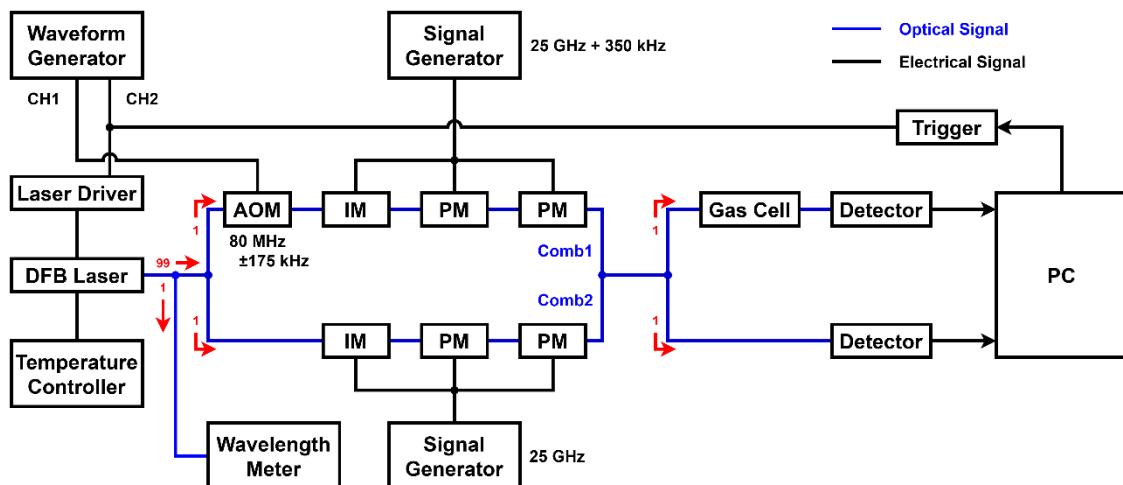


図 10 自動補間法によるデュアル EO コム分光系

EO コムのモード間隔は信号発生器(Signal Generator)から印加される周波数によって決まる。先行研究では 2 つの EO コムのモード間隔をそれぞれ 25 GHz、25 GHz+350 kHz としている。

マイクロ波領域における RF コムスペクトルの中心周波数は、AOM を駆動する周波数 f_{AOM} で決まり、先行研究では 80 MHz としている。また、RF コムのモード間隔は 2 つの EO コムのうなりによって決まる。したがって RF コムの中心周波数は 80 MHz、モード間隔は 350 kHz となるため、光領域では 25 GHz、マイクロ波領域では 350 kHz(±175 kHz)だけ周波数シフトを行えば良いことがわかる。

レーザと AOM の周波数の同期には、2CH を持った波形発生器(Waveform Generator)によってレーザドライバと AOM を同期し、周波数シフトを行っている。

レーザの周波数は、三角波によってレーザドライバの出力電流を周期的に制御して変調を行っており、波形発生器の CH2 によって三角波の電圧値を 25 GHz の周波数シフトに対応する 1.660 V_{p-p} として設定した。

AOM の周波数は、変調波によって周波数シフトさせており、波形発生器の CH1 に

よって $80 \text{ MHz} \pm 175 \text{ kHz}$ 間で周波数を変化させるように設定する。この時に CH1 の変調信号を CH2 の三角波と同期することで、レーザと AOM の周波数を同期させ、周波数シフトを行うことを可能としている。(図 11)

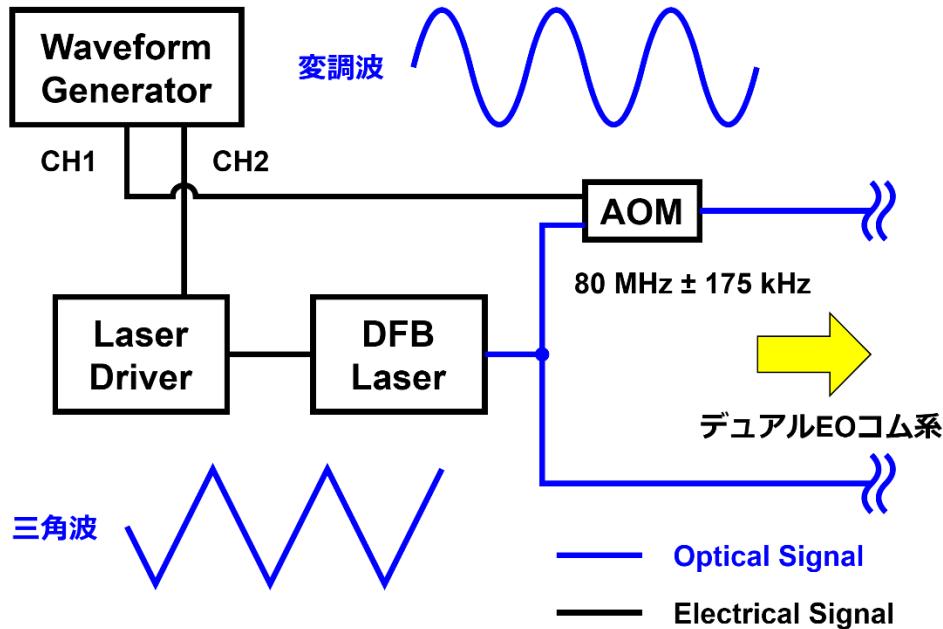


図 11 自動補間法の原理

3.2 データ取得方法

図 10において、三角波はレーザの周波数シフトを行うと同時に、トリガ信号としてディテクター(Detector)によって光電変換された信号を取得する測定器が、データ取得のタイミングを決める役割を持っており、先行研究では光領域で 25 GHz 、マイクロ波領域で $\pm 175 \text{ kHz}$ の周波数シフトが 1 回だけ行われたタイミングでデータ取得を行っている。

ここで、測定器のデータ取得時間は、サンプリング数及びサンプリングレートによって決まり、先行研究ではサンプリング数を $2^{24} = 16777216$ 、サンプリングレートを 1.8 GS/s としている。したがってデータ取得時間 Δt は

$$\Delta t = \frac{\text{サンプリング数}}{\text{サンプリングレート}} = \frac{2^{24}}{1.8 \times 10^9} = 9.32068 \times 10^{-3} \approx 9.32 \text{ [ms]} \quad (1)$$

となる。先行研究ではこのデータ取得時間内でちょうど 1 回だけ周波数シフトを行い、スペクトル間の補間を行っている。また、三角波の電圧値もちょうど 25 GHz だけシフトするように設定されているため、データ取得時間 Δt と三角波の半周期 $T/2$ が一致するように設定した。(図 12)

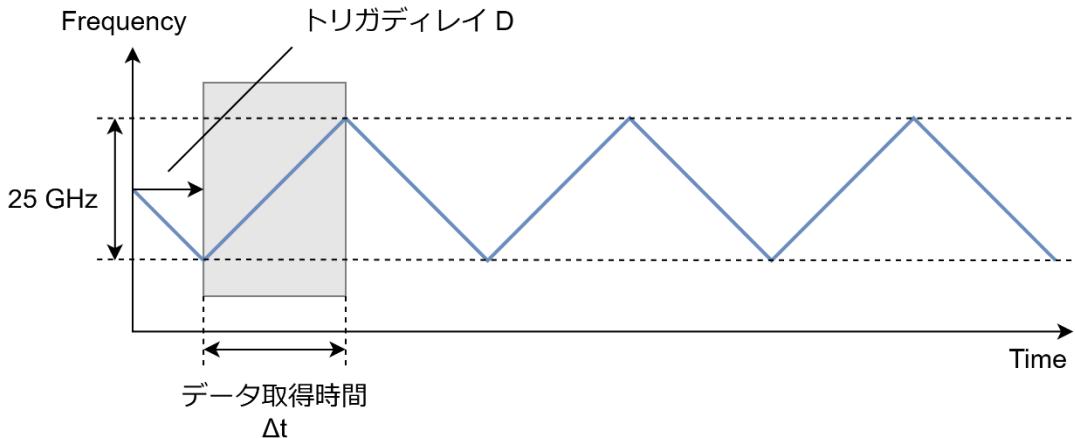


図 12 データ取得タイミングの決定

したがって三角波の周期 T は、式(1)から

$$T = \frac{\Delta t}{2} \times 2 = \Delta t \times 2 = 18.64136 \times 10^{-3} \approx 18.64 [\text{ms}] \quad (2)$$

となるため、三角波の周波数 F は、式(2)から以下のように求まる。

$$F = \frac{1}{T} = 53.6441803 [\text{Hz}] \quad (3)$$

「3.1 自動補間法を用いたデュアル EO コム分光系」で記した通り、波形発生器の CH2 の三角波と CH1 の変調信号は同期されているので、CH1 の変調波信号の周波数も、CH2 の三角波の周波数 F と一致する。

また、データ取得時間については式(1)で算出したが、データ取得の開始タイミングは、図 12 に示したトリガディレイによって決める。先行研究では、トリガディレイ D を

$$D = \frac{\Delta t}{2} = \frac{T}{4} = 4.6603378 \times 10^{-3} \approx 4.66 [\text{ms}] \quad (4)$$

と設定した。

3.3 Mathematica を用いたデータ処理

図 10において、図 6で記したデュアル EO コム分光法で生成した RF コムを、 2×2 カプラで合波し、2 分岐させた後、片側はガスを封入したガスセルを透過させた透過光とし、もう片側は参照光として、それぞれスペクトル信号をディテクターによって光電変換し、PC に取り込んでいる。取得したデータは時間波形になるため、Mathematica を用いてフーリエ変換し、時間波形から周波数スペクトルに変換させている。

また、先行研究では EO コムを測定に用いるために RF コムとしているので、PC 内でマイクロ波領域から光領域に変換を行い、変換後のデータをファイルとして保存するプログラムを Mathematica によって行っている。

したがって、Mathematica を用いたデータ処理を行う前のスペクトル信号は、中心周波数 80 [MHz]、モード間隔 350 kHz で、周波数シフト量が 350 kHz となっている。この RF コムに倍率(25 GHz / 350 kHz)をかけることで、モード間隔 25 GHz、周波数シフト量が 25 GHz となるようにしている。なお、中心周波数はレーザの中心波長によって変化するため、測定毎に変化する。中心波長を λ_0 とすると、中心周波数 F_0 は

$$F_0 = \frac{299792458}{\lambda_0} [\text{Hz}] \quad (5)$$

で算出することができる。しかし、光領域からマイクロ波領域に変換するタイミングで、AOM を用いて片側の EO コム全体を 80 MHz だけ周波数シフトしているため、データ全体から RF コムの中心周波数 80 MHz に倍率をかけた値を引く必要がある。したがってマイクロ波領域から光領域に変換するための周波数シフト量 N は、式(5)から

$$N = F_0 - f_{\text{AOM}} \times (\text{倍率}) = \frac{299792458}{\lambda_0} - 8.0 \times 10^7 \times \frac{2.50 \times 10^{10}}{3.50 \times 10^5} [\text{Hz}] \quad (6)$$

となる。(図 13)

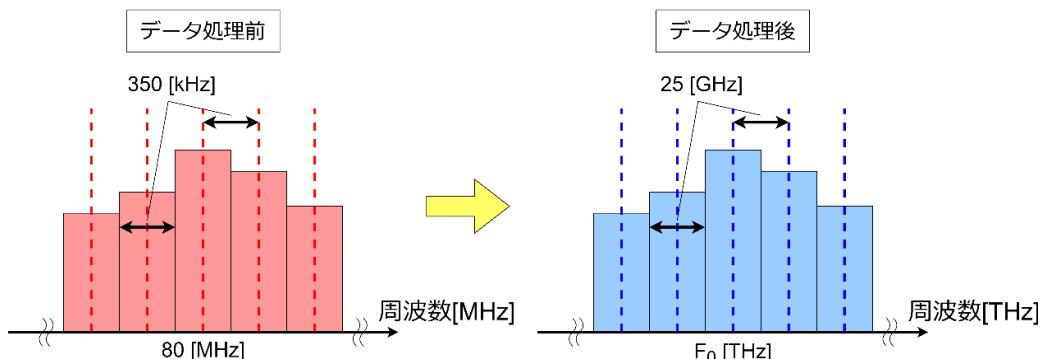


図 13 データ処理によるマイクロ波領域から光領域への変換

3.4 除算による吸収線スペクトルの取得

「3.3 Mathematica を用いたデータ処理」でも記した通り、図 10において、2 分岐させた RF コムの片側を、ガスセルを透過させた透過光とし、もう片側を、試料を何も透過させない参照光として、それぞれディテクターを通った後、PC に取り込んでいる。ここで試料を何も透過させなかった参照光は、ガスセルを透過する前の透過光と一致する。そのため、透過光を参照光で除算することで、分子が吸収した周波数の光及び透過率を検出することができる。また、透過光を参照光で除算することで、レーザの出力の変動も除去することができる。(図 14)

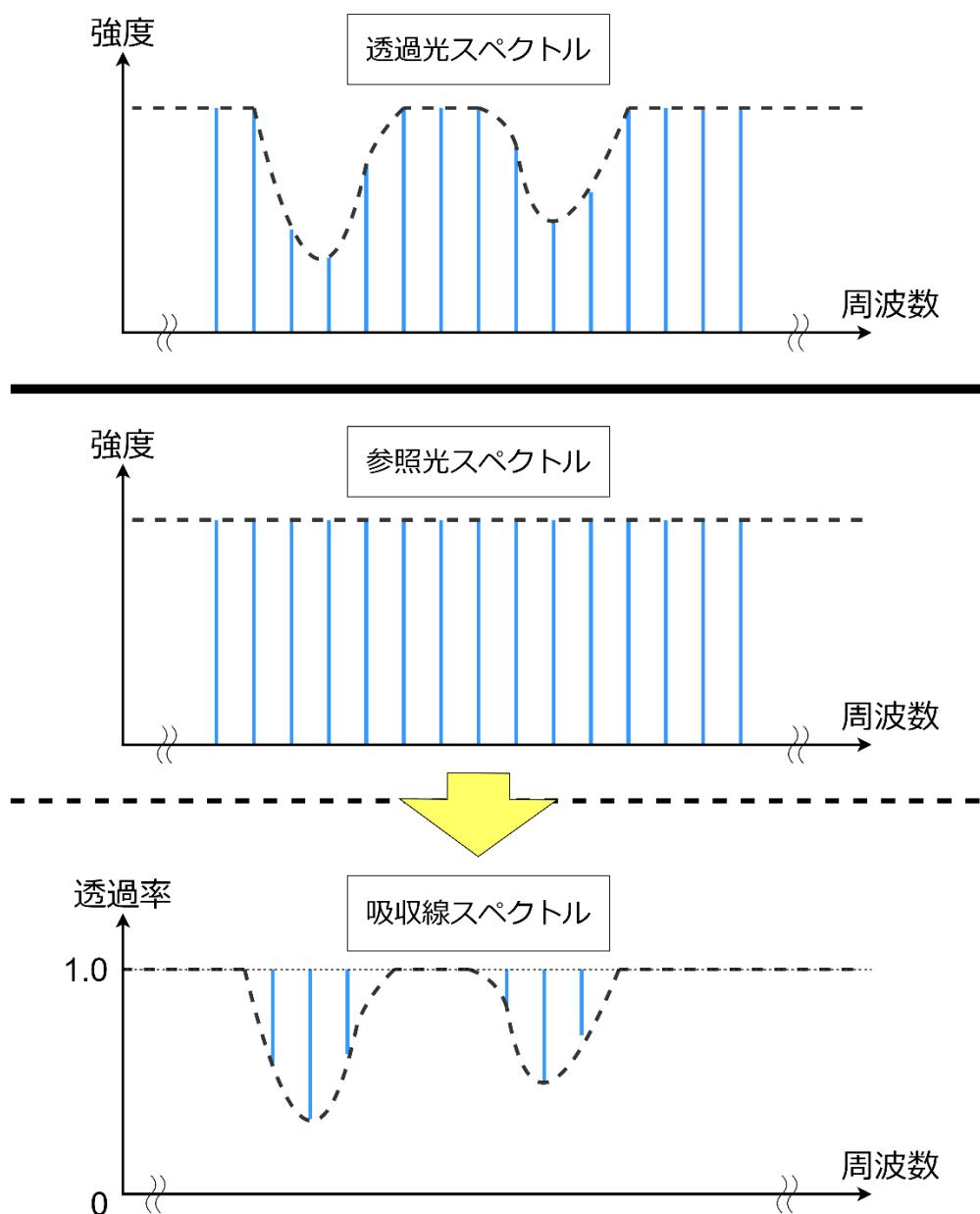


図 14 参照光・透過光スペクトルから吸収線スペクトルの取得

3.5 補間前後の EO コムの測定結果

補間前の EO コムを図 15 に、補間後の EO コムを図 16 に示す。

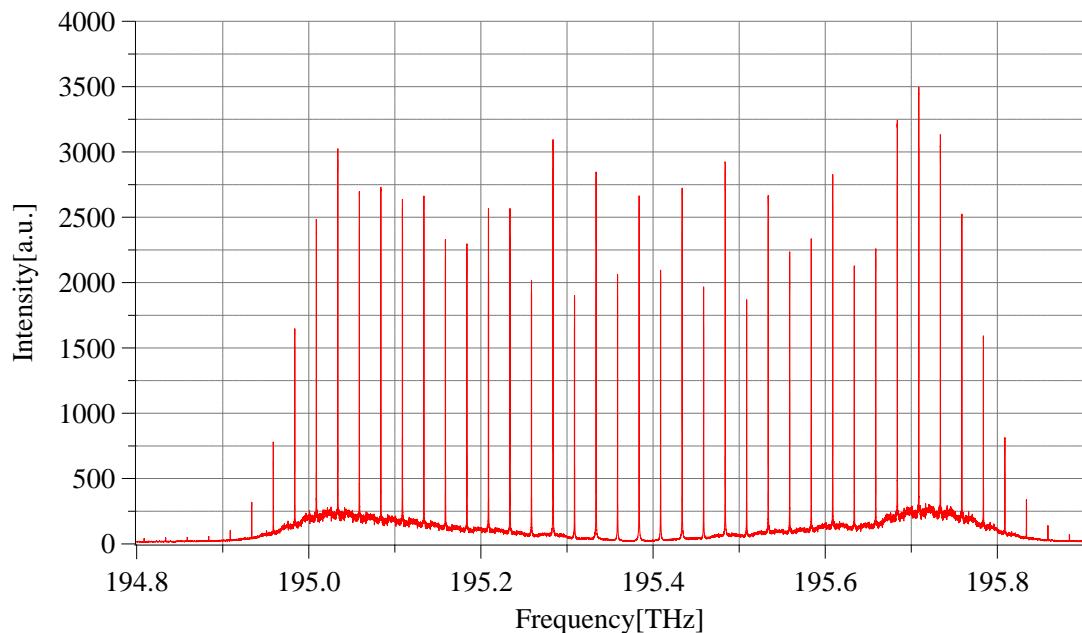


図 15 補間前の EO コム
(2025.01.17 測定 中心波長 1534.3640 nm)

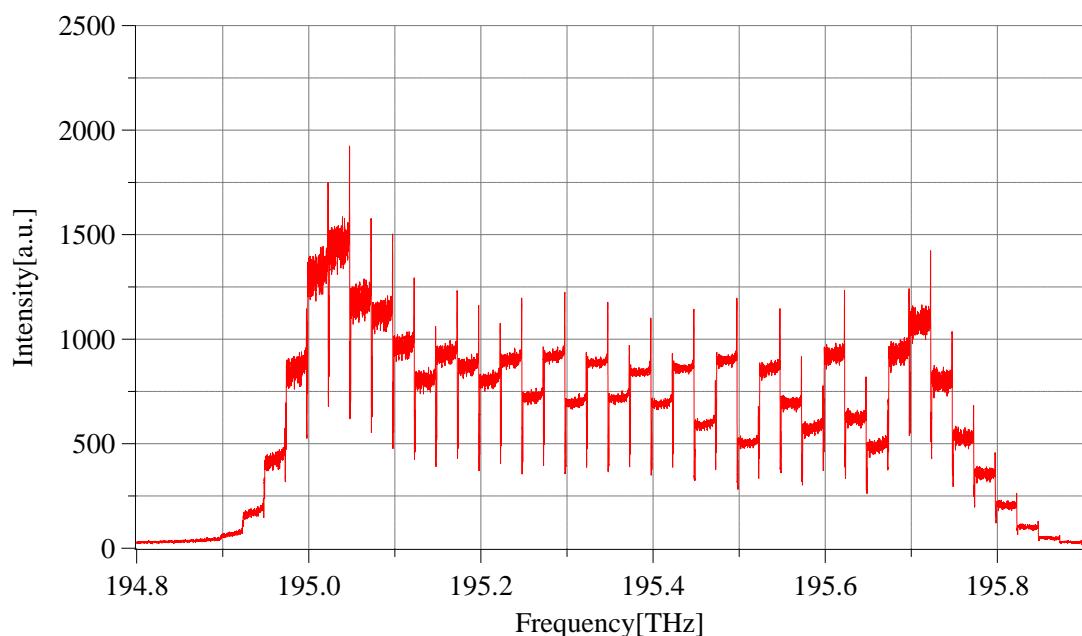


図 16 補間後の EO コム
(2025.01.17 測定 中心波長 1534.4300 nm)

図 15 では輝線スペクトルが 25 GHz 間隔で並んでいるのに対し、図 16 では 25 GHz の EO コムのモード間隔が埋まっていることが確認できる。

ここで、補間後の EO コムの失敗例を図 17、18 に示す。

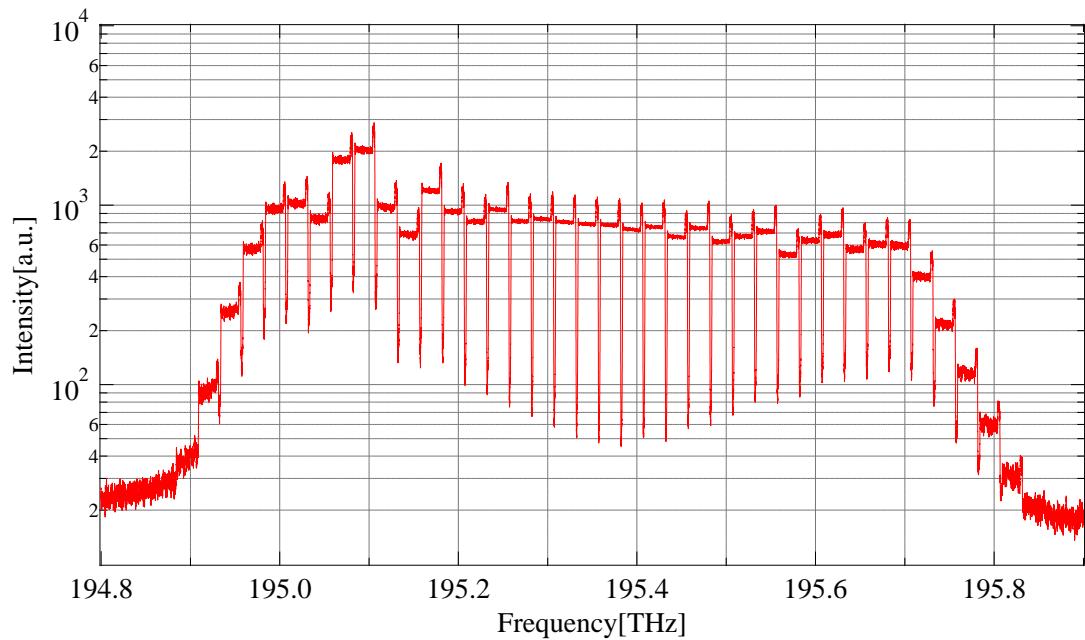


図 17 補間後の EO コムの失敗例①
(2024.9.26 測定 中心波長 1534.51273 nm)

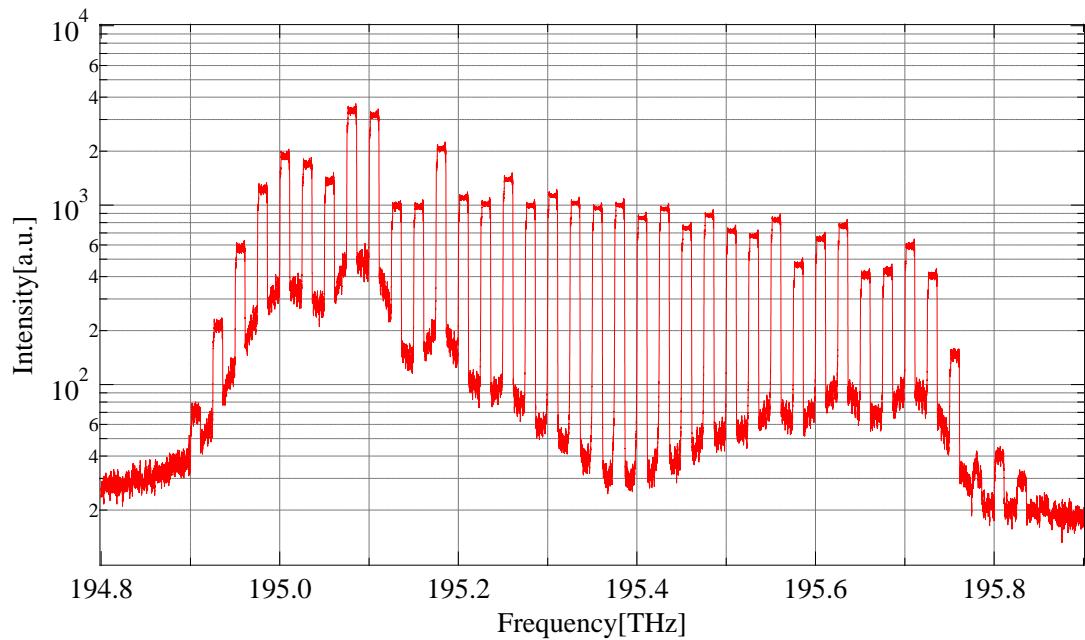


図 18 補間後の EO コムの失敗例②
(2024.9.24 測定 中心波長 1534.45689 nm)

図 17 では、図 16 と同様に 25 [GHz] のモード間隔が補間され、ほとんど埋まっているが、スペクトルの境界部分に飛び出している箇所を確認することができる。先行研究では、図 12 のようにデータ取得時間 Δt と三角波の半周期 $T/2$ が一致するように設定されているため、トリガが少しでもずれてしまうと、三角波の折り返しがデータ取得のタイミングに入ってしまうため、同じ周波数成分でダブリが発生し、スペクトルの境界部分が飛び出てしまったと考えられる。(図 19)

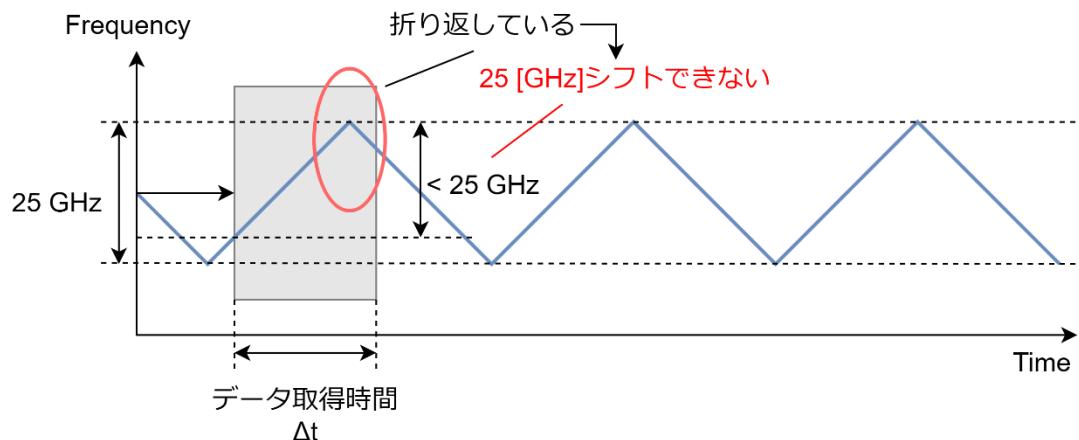


図 19 スペクトル境界部分が飛び出る原因

図 18 では、図 17 のように飛び出ている箇所はないが、スペクトルの境界部分に大きなすき間が発生していることが確認できる。この時、スペクトルの補間量とすき間がほとんど一致していることから、データ取得時間内全体でスペクトルが飛び出ていると考えられる。(図 20)

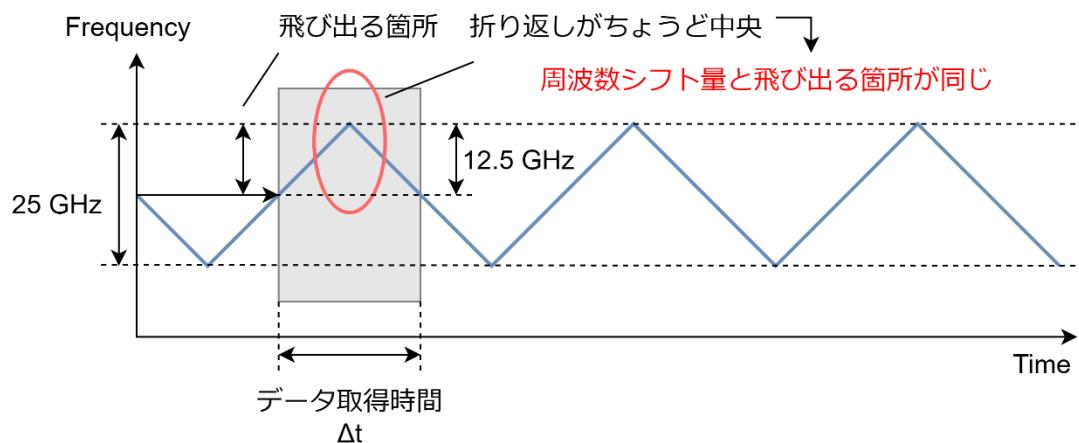


図 20 スペクトル境界部分にすき間ができる原因

3.6 まとめ

先行研究の提案手法をもとに、再現実験を行った。先行研究では、電気信号によつてレーザの周波数と AOM の周波数を同期させ、周波数シフトを行うことで、光領域及びマイクロ波領域のスペクトルのモード間隔を補間し、埋めていた。また、レーザの周波数をシフトしている三角波の電圧値を、ちょうど 25 GHz だけシフトするようにし、データ取得時間内で 1 回だけ周波数シフトを行うように設定していた。

しかし先行方式では、トリガ信号が少しでもずれてしまうと、データ取得のタイミングに三角波の折り返しが入ってしまうため、同じ周波数成分でダブりが発生し、スペクトル境界部分が飛び出てしまい、スペクトル境界部分にすき間が発生してしまう問題があり、正常に補間されたデータを取得するのが困難であった。

また、三角波の折り返しが入ると、25 GHz の周波数シフトも行えなくなるため、スペクトル境界部分が飛び出てしまうと、必然的に周波数シフト量も足りなくなってしまうことが分かった。(図 21)

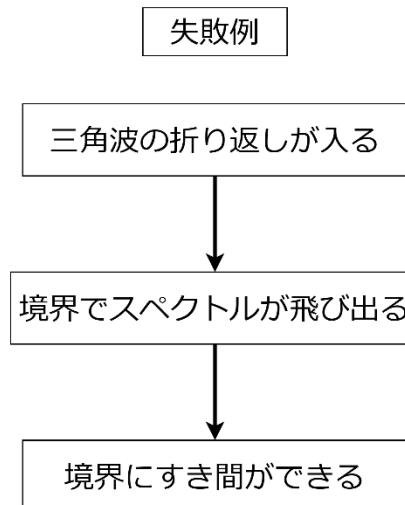


図 21 正常に補間が行えない原因のまとめ

4. 提案手法

4.1 三角波電圧波形の最適化

先行研究では、三角波の半周期の時間内ちょうどに 1 回分の周波数シフトを行い、 25 GHz だけ周波数シフトするように設定されていたため、トリガの少しのズレでデータ取得時間内に三角波の折り返しが入ってしまい、正常に補間するのが困難といった問題があった。そこで本研究では、データ取得時間は変えずに、三角波の周期、電圧値を大きくし、トリガディレイ値を調節することで、データ取得のタイミングを最適化する手法を提案する。これにより、トリガによるデータ取得のタイミングが多少ずれても、三角波の折り返しが入らず、正常に補間されたデータを容易に取得することが可能になると考えた。

本提案手法では、データ取得時間は変えずに、三角波の周期を 1.2 倍とし、電圧値を決定した。これにより、電圧値は $25 \text{ GHz} (\pm 175 \text{ kHz})$ の 1.2 倍である $30 \text{ GHz} (\pm 210 \text{ kHz})$ の周波数シフトに対応するように設定すればよいことがわかる。(図 22)

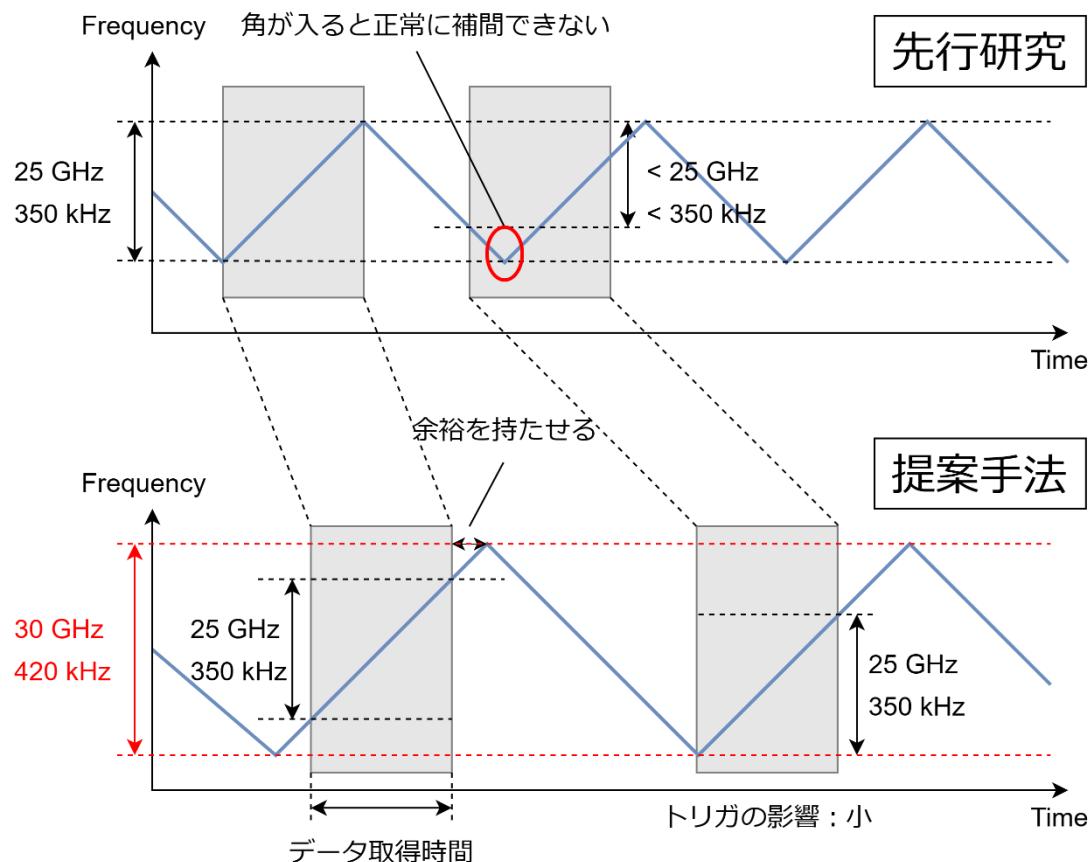


図 22 先行研究と提案手法の比較

4.2 各パラメータの決定

4.2.1 波長計を用いた周波数シフト量の測定

図 22 から、三角波の電圧値を 30 GHz の周波数シフトに対応するように設定する必要があるため、波長計を用いて先行研究の 25 GHz 及び提案手法の 30 GHz の周波数シフト量が行われる電圧値を測定した。

なお、三角波の周期が短いと、波長計の分解能が足りず、測定することが出来ないため、三角波の周期を 10 s (0.1 Hz) と設定し、測定を行った。(図 23、24)

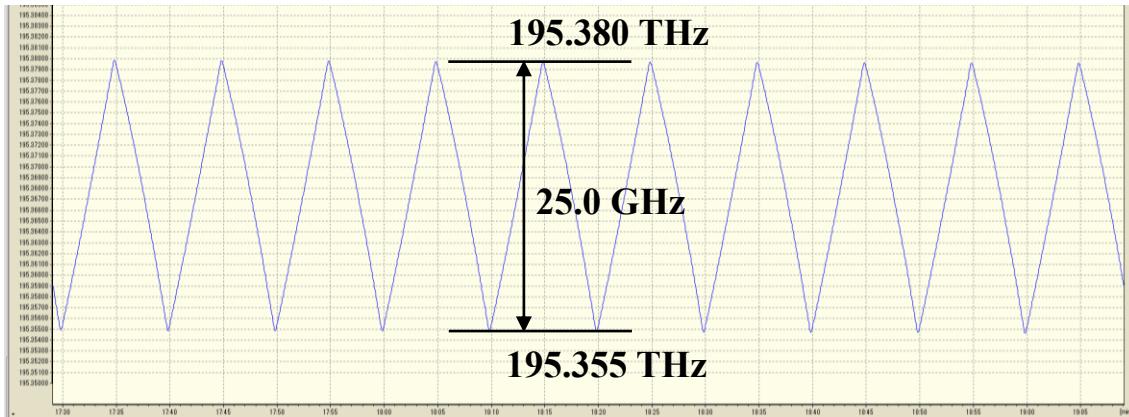


図 23 波長計を用いた周波数シフト量の測定①
(2024.9.17 測定 電圧値 1.380 Vp-p 横軸:時間[s] 縦軸:周波数[THz])

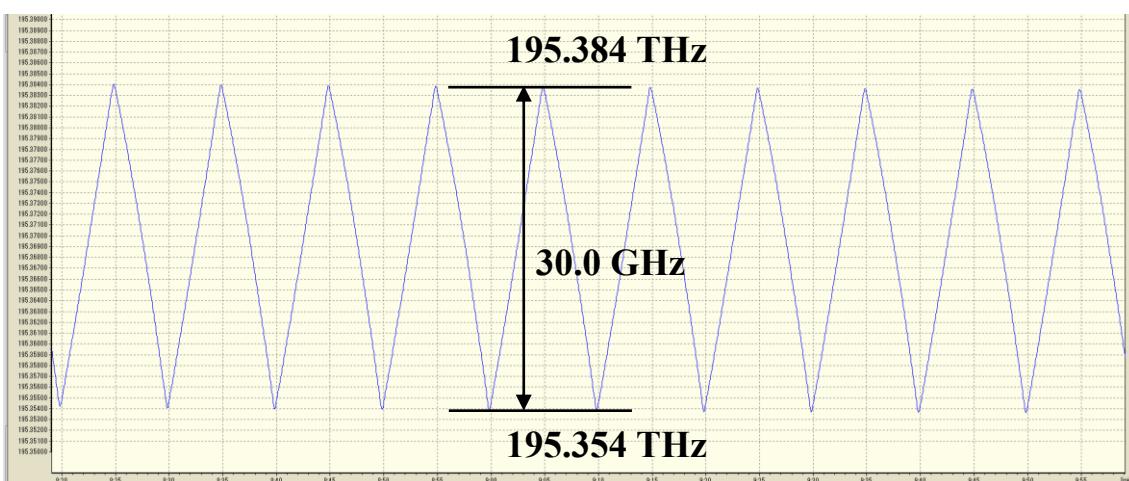


図 24 波長計を用いた周波数シフト量の測定②
(2024.9.17 測定 電圧値 1.698 Vp-p 横軸:時間[s] 縦軸:周波数[THz])

先行研究では 25 GHz の周波数シフトに対応する三角波の電圧値が 1.660 Vp-p となっていたが、本研究で用いたレーザドライバを、Newport 社から Thorlabs 社に変えたことにより、今回測定した結果、電圧値が 1.380 Vp-p のとき 25 GHz の周波数シフトが行われることがわかった。また、30 GHz の周波数シフトに対応する三角波の電圧値

は図 24 から 1.698 Vp-p であったため、本研究では電圧値を 1.698 Vp-p として設定した。

4.2.2 三角波の周期、周波数、トリガディレイの算出・決定

本提案手法では、データ取得時間は変えずに、三角波の周期を 1.2 倍としている。したがって、三角波の周期 T' は、式(2)から

$$T' = 1.2 \times T = 22.369632 \times 10^{-3} \approx 22.37 \text{ ms} \quad (7)$$

となるため、三角波の周波数 F' は、式(7)から以下のように求まる。

$$F' = \frac{1}{T'} = 44.7034623 \text{ Hz} \quad (8)$$

次に、トリガディレイ D' について述べる。(図 25)

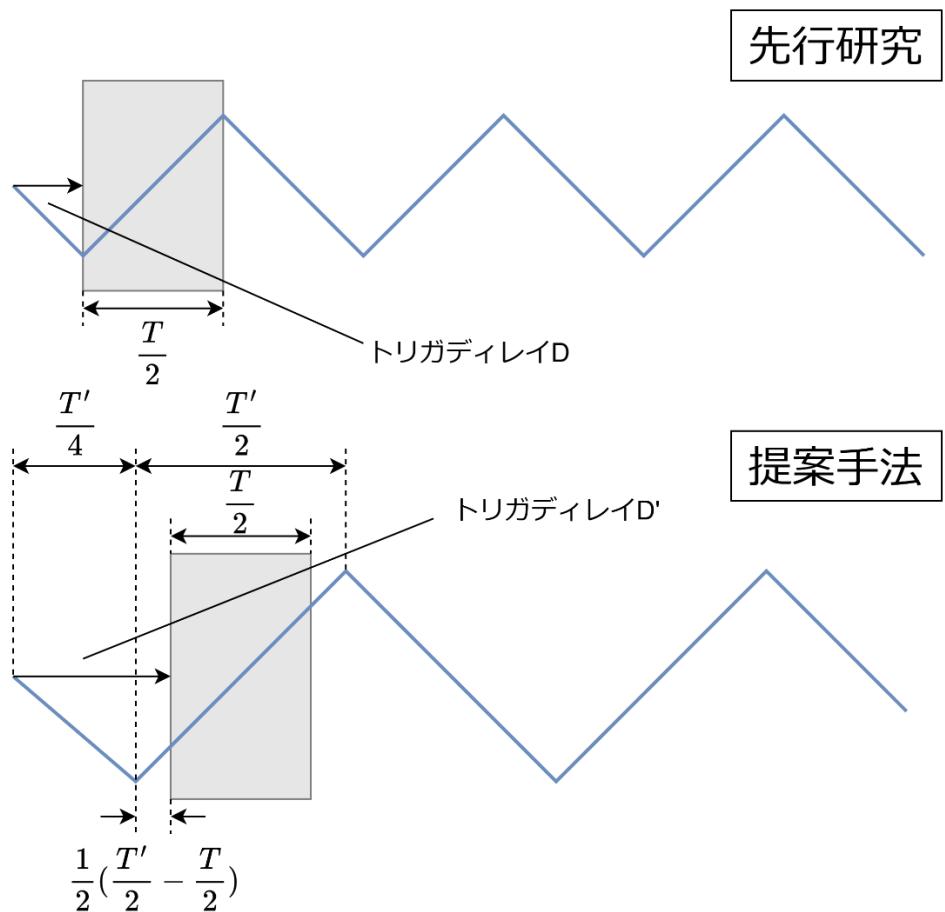


図 25 トリガディレイ D' の算出方法

図25にトリガディレイD'の算出方法について示した。前述したとおり、本提案手法では、データ取得時間は変えていないため、本提案手法の半周期とデータ取得時間との残差Yは

$$Y = \frac{T'}{2} - \Delta t = \frac{T'}{2} - \frac{T}{2} \quad (9)$$

となる。ゆえに、本提案手法のトリガディレイD'は、式(2)(7)(9)から

$$\begin{aligned} D' &= \frac{T'}{4} + \frac{Y}{2} \\ &= \frac{T'}{4} + \frac{1}{2} \left(\frac{T'}{2} - \frac{T}{2} \right) \\ &= \frac{T'}{2} - \frac{T}{4} \\ &= \frac{1.2 \times T}{2} - \frac{T}{4} \\ &= 0.35 \times T = 6.524473 \times 10^{-3} \approx 6.52 \text{ ms} \end{aligned} \quad (10)$$

と求まる。本研究では測定を重ねた結果、三角波周波数F'及びトリガディレイD'を以下のように設定した。

$$\begin{cases} F' = 44.703486 \text{ Hz} \\ D' = 0.00652260 \text{ s} \end{cases} \quad (11)$$

以上より、本提案手法と先行研究の各パラメータを表1にまとめる。

表1 設定した各パラメータと先行方式との比較

	先行方式	提案手法
周波数シフト量	25 GHz, 350 kHz	30 GHz, 420 kHz
三角波電圧	1.660 V _{P-P} (1.380 V _{P-P})	1.698 V _{P-P}
三角波周期	18.64 ms	22.37 ms
三角波周波数	53.6441803 Hz	44.703486 Hz
トリガディレイ	0.0046603378 s	0.0065226000 s

5. 提案手法による測定結果

5.1 提案手法による RF コムの測定

PC 内で取得した時間波形を、Mathematica を用いてフーリエ変換のみ実行した RF コムの参照光スペクトルを図 26 に示す。

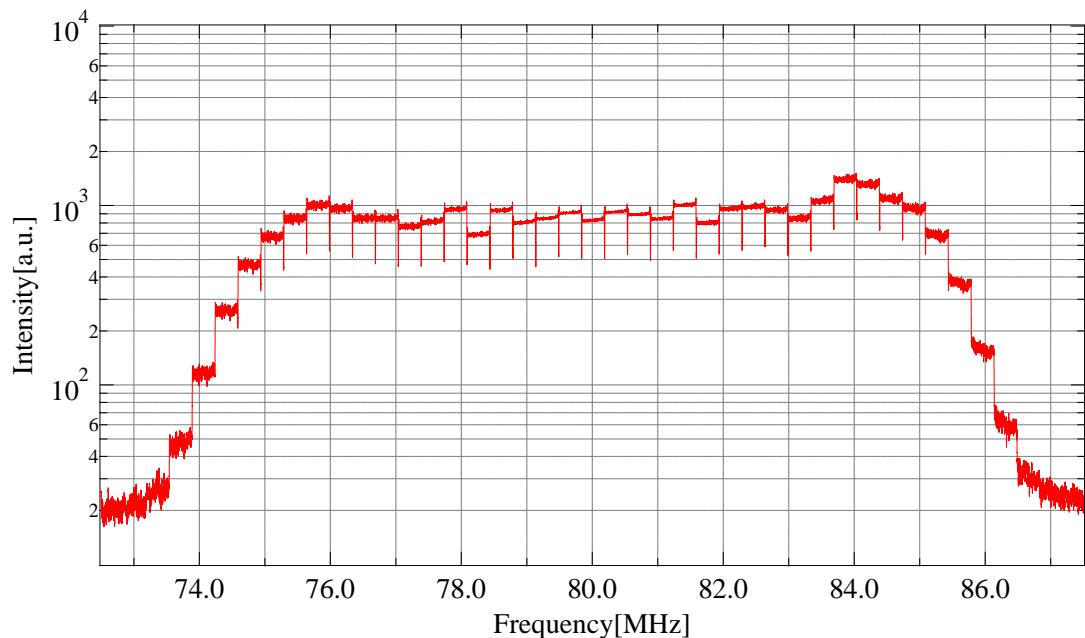


図 26 フーリエ変換後の RF コムの参照光スペクトル
(2024.10.23 測定 中心波長 1534.5710 nm)

図 25 から、中心周波数が 80 MHz、モード間隔 350 kHz が補間された RF コムが、スペクトル境界部分で飛び出ず、かつすき間のないスペクトルを測定することができた。

次に、図 26 の参照光スペクトルに透過光スペクトルを重ねた結果を図 27 に示す。

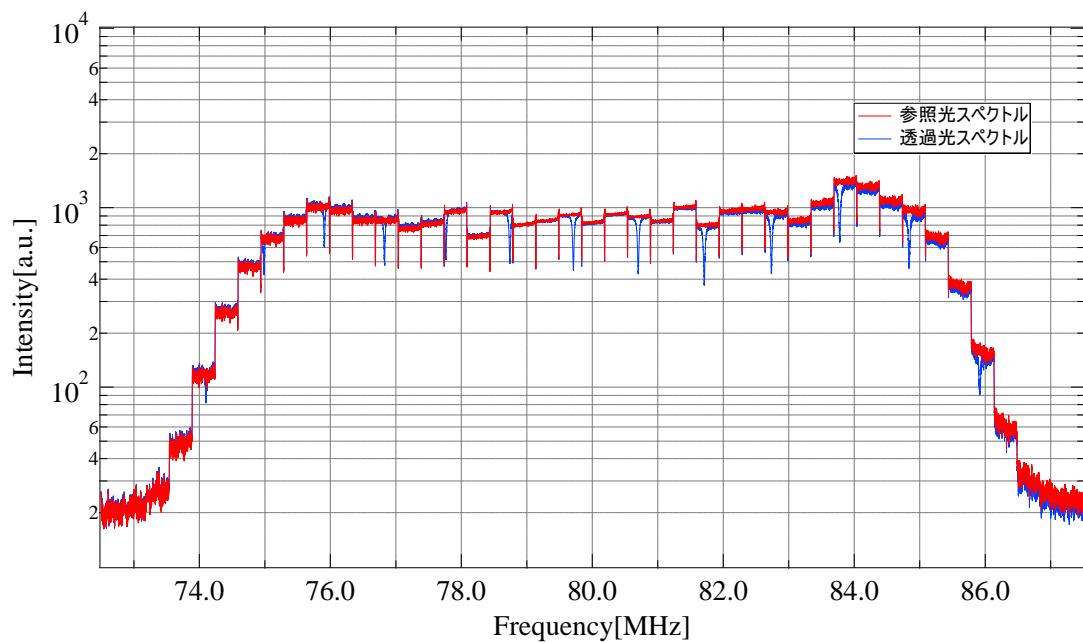


図 27 RF コムの参照光・透過光スペクトル
(2024.10.23 測定 中心波長 1534.5710 nm)

図 27において、青で示した透過光スペクトルを見ると、参照光スペクトルに比べて、強度が落ちている周波数成分が複数箇所確認することができる。これが、分子が吸収した周波数の光とわかるので、参照光スペクトルと透過光スペクトルの除算によって吸収線スペクトルの測定が可能になる。

5.2 光領域変換後の EO コムの測定

PC 内で取得した RF コムに、「3.3 Mathematica を用いたデータ処理」で記したデータ処理を行うことで取得できる、マイクロ波領域から光領域に換算された EO コムの参照光・透過光スペクトルを図 28 に示す。

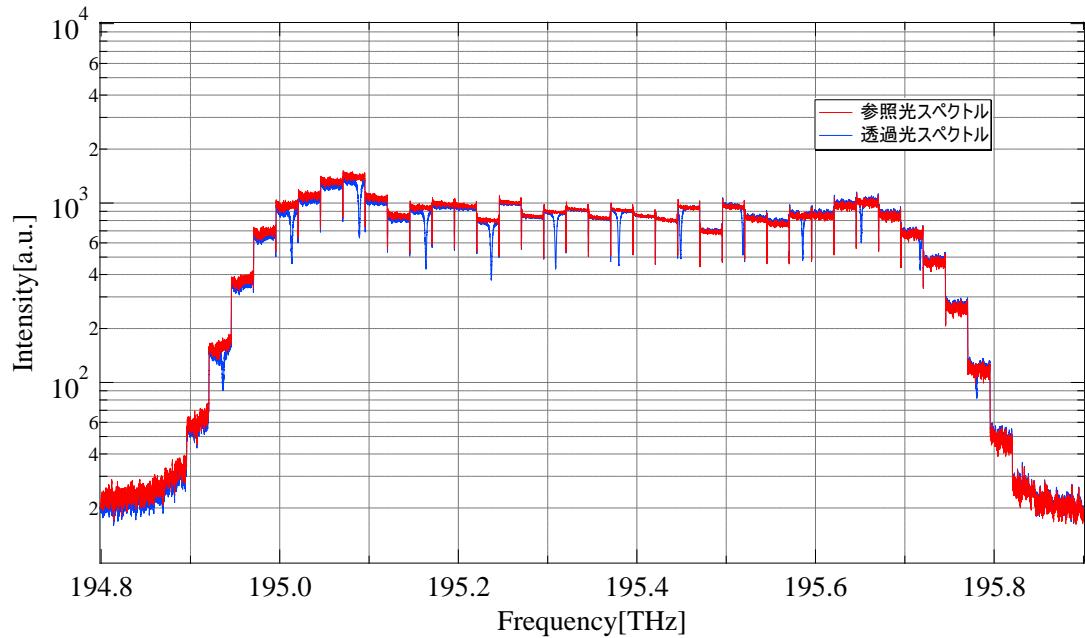


図 28 光領域に換算された EO コムの参照光・透過光スペクトル
(2024.10.23 測定 中心波長 1534.5710 nm)

図 28 から、図 27 の補間された 2 種類のスペクトル信号が、データ処理によって光領域に変換されていることがわかる。

今回測定した EO コムの中心波長は、波長計から 1534.5710 nm であったため、レーザーの中心周波数 F_0 は、式(5)から

$$F = \frac{299792458}{1534.5710 \times 10^{-9}} = 195.359132 \times 10^{12} \approx 195.36 \text{ THz} \quad (12)$$

となり、モード間隔 25 GHz が、正常に補間された EO コムを測定することができた。

5.3 吸収線スペクトルの測定

本研究で、ガスセルに封入したガスはシアン化水素 $\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$ であった。図 28 から、除算によって得られた吸収線スペクトルを図 29 に、拡大図を図 30 に示す。なお、図 29において、青で示しているものは HITRAN のデータベースから入手したシアン化水素 $\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$ の吸収線スペクトルである。^[4]

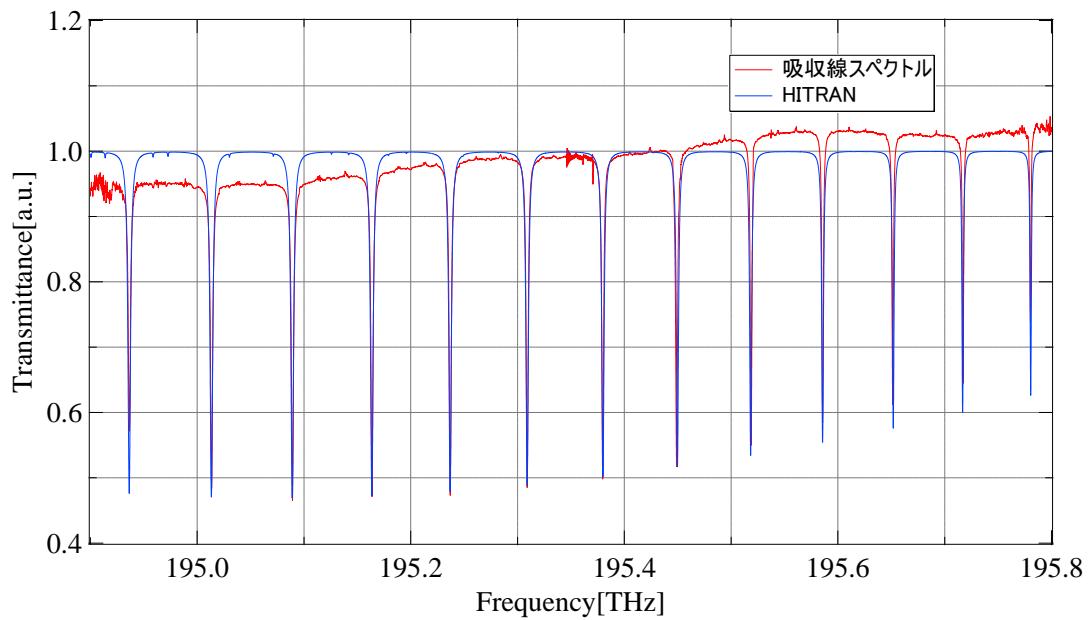


図 29 除算によって得られた吸収線スペクトル
(2024.10.23 測定 296 K (22.85 °C) 25 Torr (0.033 atm))

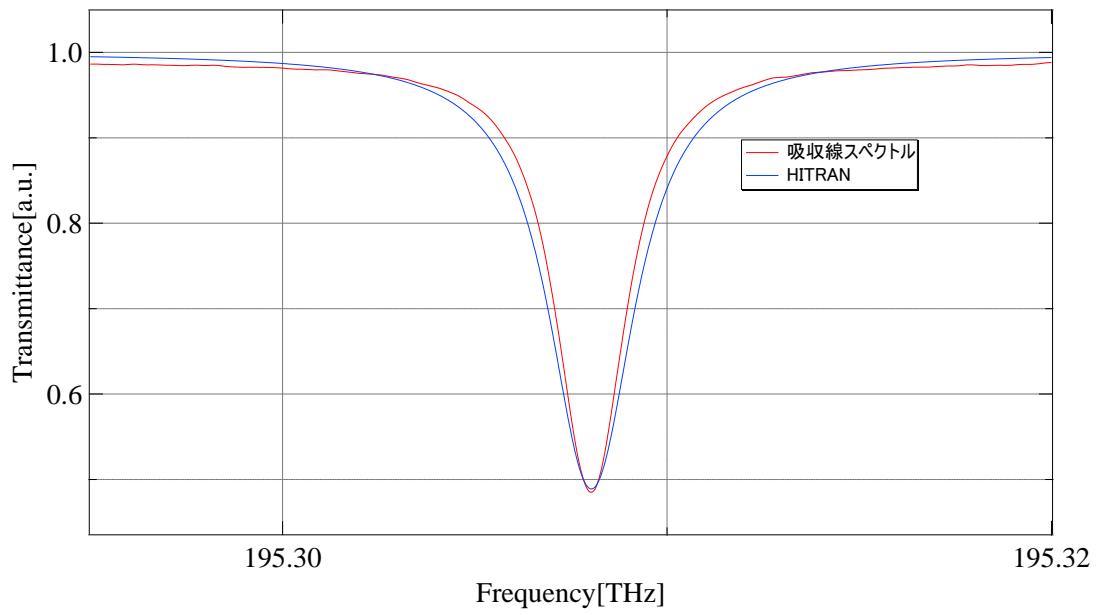


図 30 拡大図

図 29、30 から測定した吸収線スペクトルと HITRAN が重なっていることが確認できた。しかし、測定した吸収線スペクトルのベースラインが 1.0 になっていないことが確認できる。これは、 2×2 カプラで分岐したそれぞれの光スペクトルが同じ形状にならなかったことで、除算するにあたって参照光スペクトルと透過光スペクトルの強度が一致しないことが原因と考えられる。

6. 吸収線スペクトルのベースライン補正

前述のとおり、本研究で取得した吸収線スペクトルは、HITRAN と重なってはいたが、 2×2 分岐した光スペクトルが同じ形状にならなかったため、除算した際にベースラインが 1.0 とならなかった。

そこで本研究では、2 種類のソフトウェアによってそれぞれベースラインの補正を行い、取得した吸収線スペクトルを比較した。

はじめにベースライン補正を実施するにあたって、Igor 上で EO コムが生成されていない部分(ノイズ部分)を Delete Points 関数を用いて手動で除去した。(図 31)

以降、図 31 のベースライン補正前の吸収線スペクトルを元データと呼ぶ。

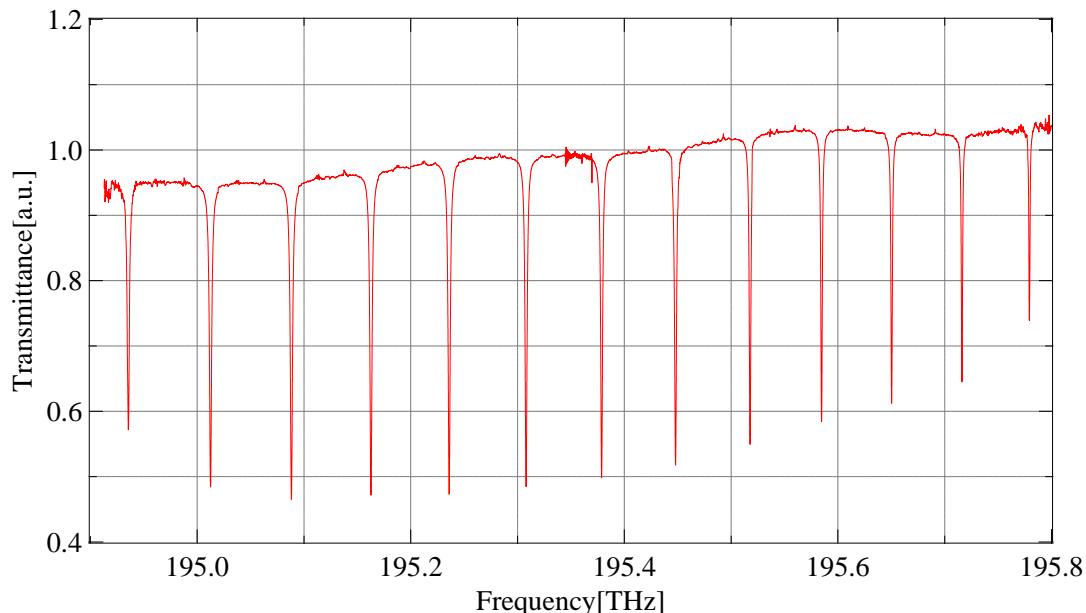


図 31 ベースライン補正前の吸収線スペクトルの元データ
(ポイント数:235,000)

6.1 Fityk を用いたベースライン補正

6.1.1 提案手法

Fityk は非線形の曲線のあてはめ及びデータ解析を行うソフトウェアである。本研究では Fityk を用いてベースライン補正を実行した後、グラフを Igor 上で表示させた。

はじめに元データの透過率(y 成分)のみを txt 形式で保存した。ここで、Fityk は txt 形式や bin 形式に対応していないため、保存した txt ファイルを、Mathematica を用いて dat 形式に変換し、保存した後、Fityk 上に取り込んだ。(図 32)

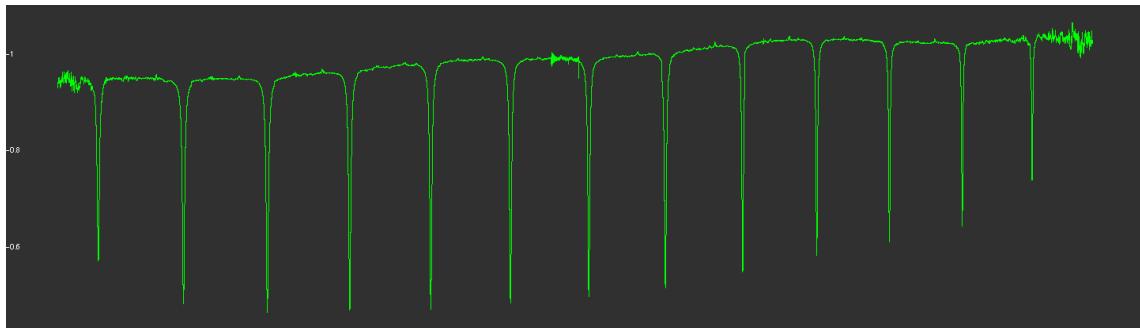


図 32 Fityk 上に取り込んだ吸収線スペクトル

次に、ベースラインとする近似曲線を決定する。本研究では、任意関数を Cubic(3 次関数)とし、手動でプロットを行うことで近似曲線を決定した。(図 33)

近似曲線を決定した後、ベースライン補正を実行した。(図 34)

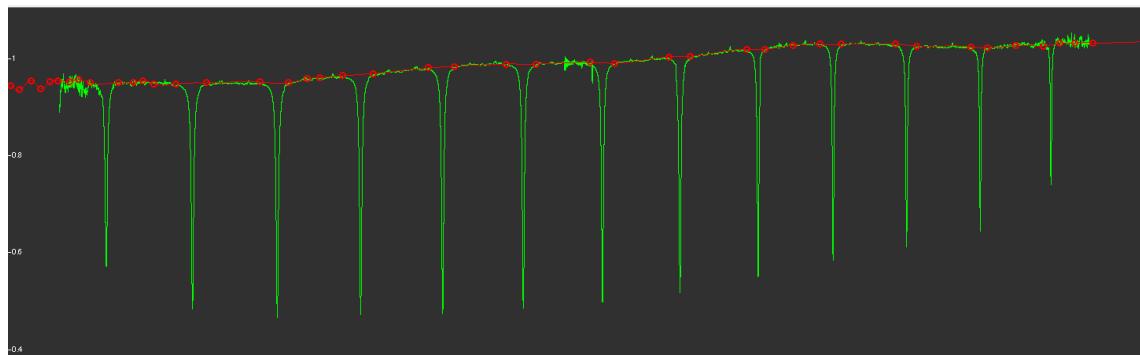


図 33 ベースラインとなる近似曲線(赤線)の決定

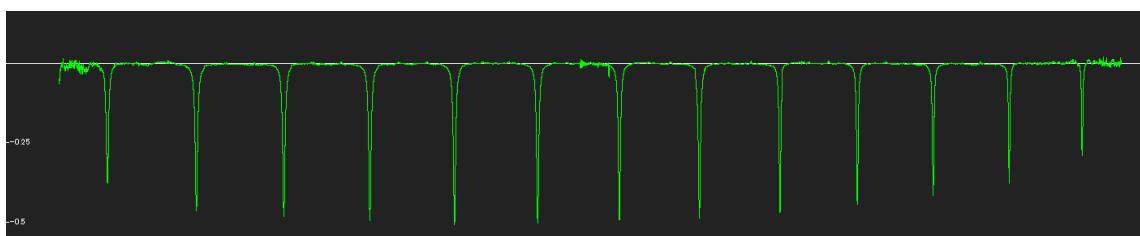


図 34 ベースライン補正後

ベースライン補正実行後、y成分のみを dat 形式で保存し、保存した dat ファイルを、再度 Mathematica を用いて txt ファイルに変換し、保存した。

この時変換した txt ファイルは y 成分のみのため、グラフとして表示させるために、元データの x 成分を用い、xy 座標として Igor 上で、ベースライン補正後の吸収線スペクトルを表示させた。

また、Fityk を用いたベースライン補正是、減算によってベースライン補正を実行しているため、ベースラインが 0 として表示される。そのため Igor 上で y 成分に 1.0 を足すデータ処理を行い、ベースラインが 1.0 となるようにした。(図 35)

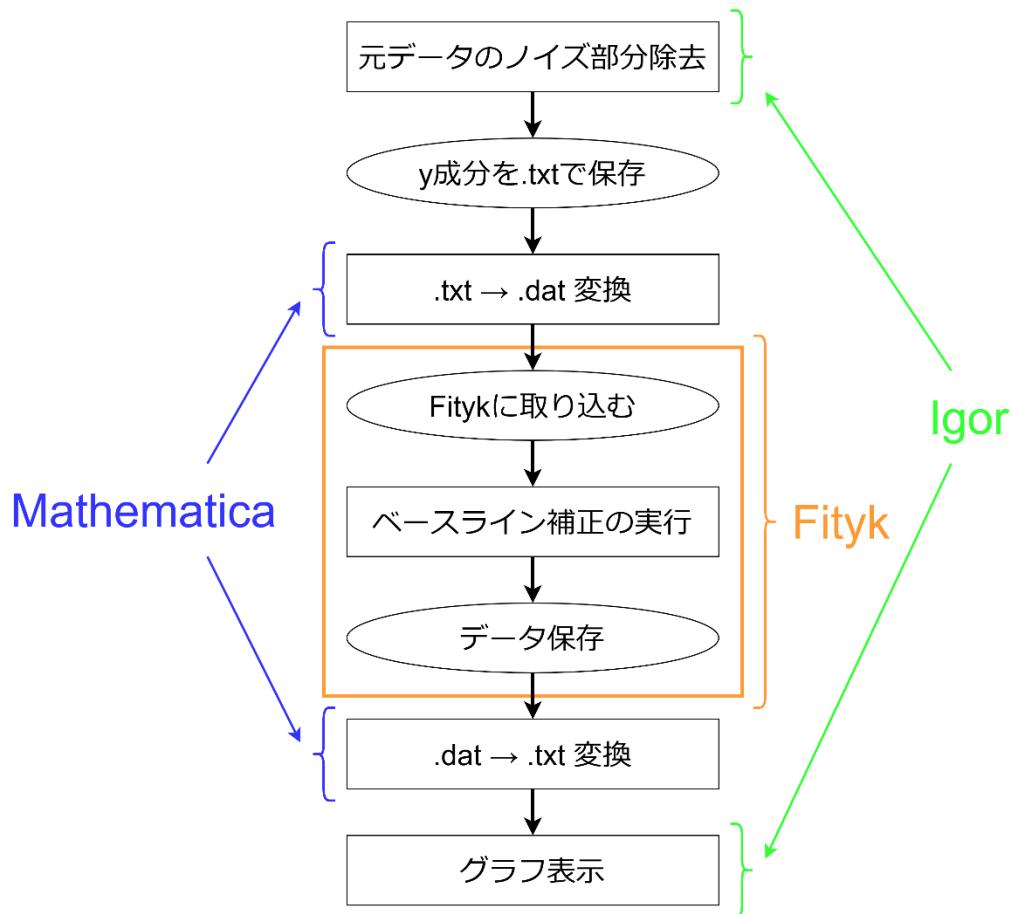


図 35 Fityk を用いたベースライン補正のフローチャート

6.1.2 提案手法による測定結果

Fityk によるベースライン補正後の吸収線スペクトルを図 36 に、拡大図を図 37 に示す。

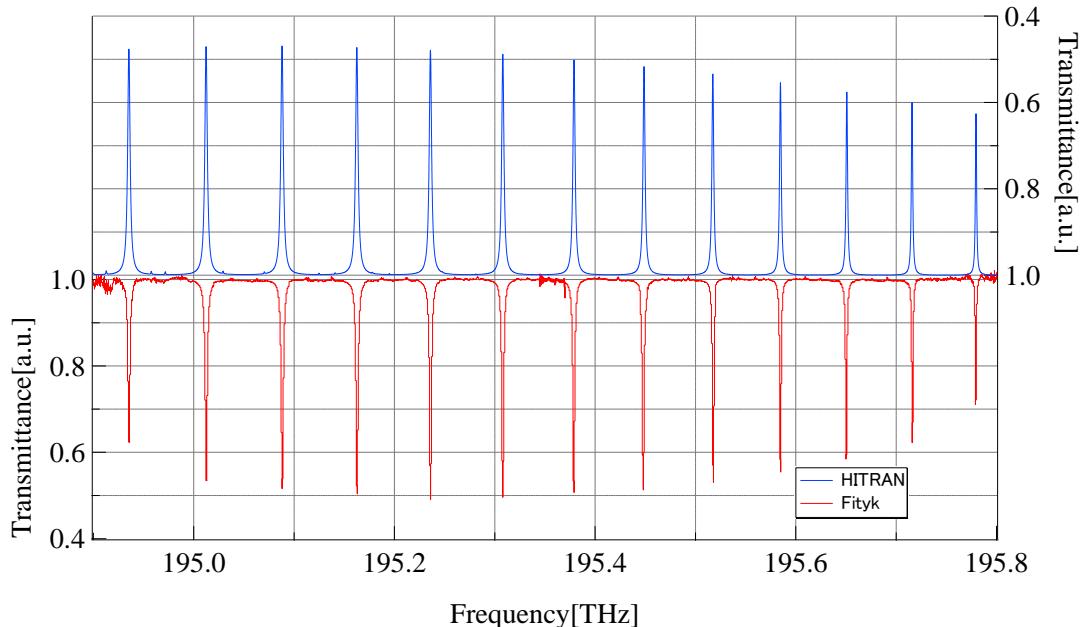


図 36 Fityk によるベースライン補正後の吸収線スペクトル
(2024.11.21 実施)

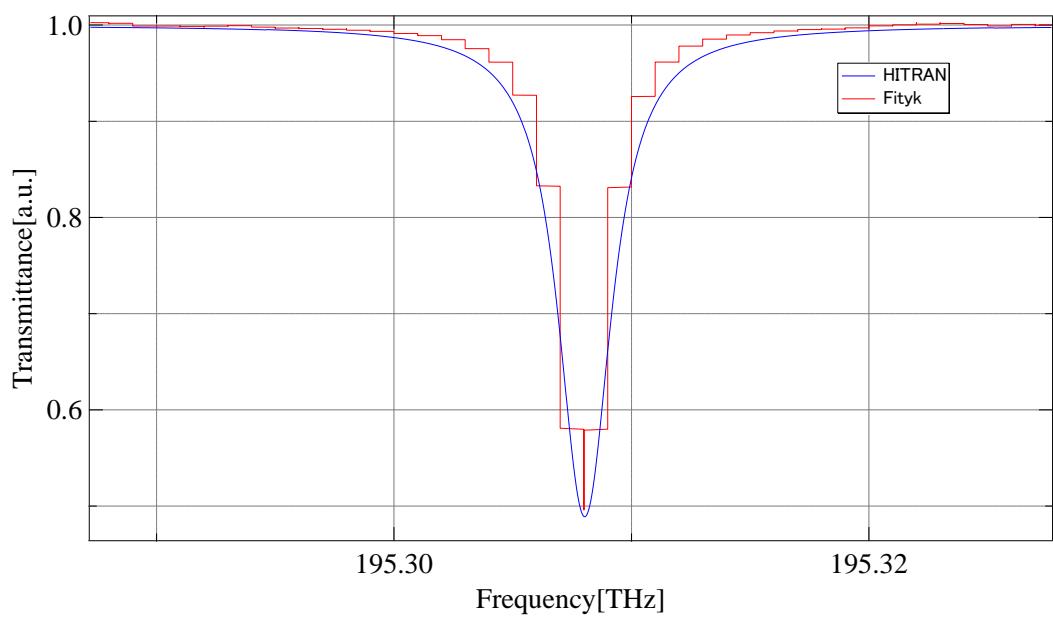


図 37 拡大図

6.1.3 測定結果による考察

図 36 から、元データで生じていたベースラインのズレが解消されているが、図 37 の拡大図からベースライン補正後の吸収線スペクトルの精度が悪くなっていたことがわかる。

そこで、Fityk 上に取り込んだデータのポイント数が多過ぎたことが、精度が悪くなつた原因と考えた。元データのポイント数が 235,000 であったことから、新たに低周波側からポイント数を 10,000 だけ切り取り、txt 形式で保存したデータを、「6.1.1 提案手法」で記した方法と同様にして Fityk を用いてベースライン補正を行った。(図 38)

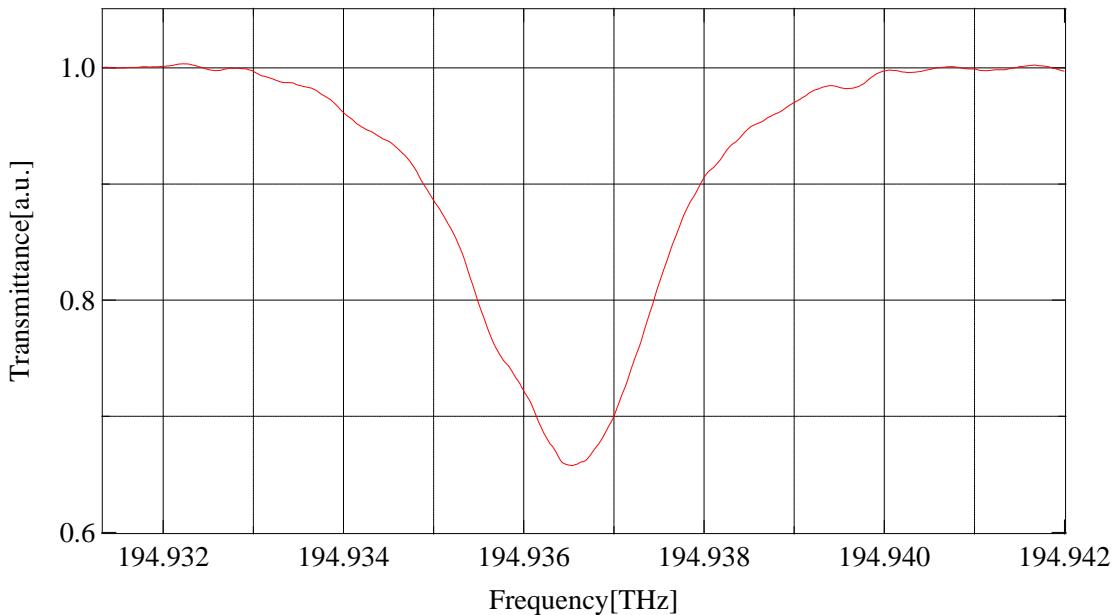


図 38 Fityk によるベースライン補正後の吸収線スペクトル(ポイント数:10,000)
(2024.12.05 実施)

ポイント数を 10,000 としてベースライン補正を実行した結果、図 38 から精度が良くなっていることがわかる。この結果から、Fityk を用いたベースライン補正ではデータのポイント数が多すぎた場合、精度が悪くなってしまって使えなくなると考えた。

また、ポイント数が 10,000 となるようにデータを分割し、分割したデータすべてにおいてベースライン補正を実行した後、すべてのデータをつなげることで元データ全体を、Fityk を用いてベースライン補正することは可能だが、これらの過程をすべて手作業で行うのは、非効率で非常に時間がかかる上に、人為的である。また、この方法はベースラインと分子の吸収線の境界がわかりにくく、実際に図 38 でも元データの透過率と異なった値となったため、近似曲線に分子の吸収線が入ってしまいやすく、透過率が本来の値と異なり、正確にベースライン補正を行うことが困難であると考えた。

以上の結果から Fityk は吸収線スペクトル全体を一度にベースライン補正することには適していないと考察した。

6.2 Curve Fitting (Igor Pro)を用いたベースライン補正

Igor Pro は Fityk と同様にデータ解析を行うことができるソフトウェアで、大量の数値データのグラフ表示や、データ処理が可能であり、中でも関数によるフィッティングが可能である。本研究では、Igor 上にある回帰分析(Curve Fitting)という機能を用いてベースライン補正を行い、吸収線スペクトルの取得を行った。

6.2.1 提案手法

Curve Fitting では、フィッティング関数(近似曲線)の種類、y 成分、x 成分を選択することで元データにベースライン補正を行うことが可能となる。(図 39)

本研究では、Igor 上に組み込まれた多項式による回帰関数(poly_XOffset)を、近似多項式としてベースライン補正を行った。また、この時変数 x の次数は 9 とした。
(0 次の次数が 1 と表示されるため、図 39 では 9 次の次数を 10 としている。)

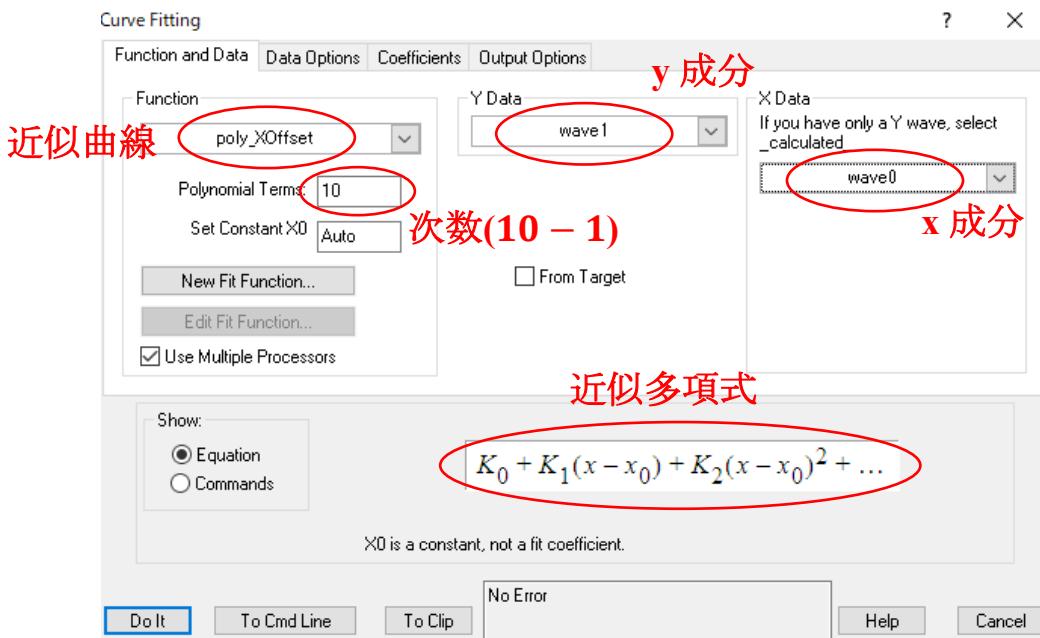


図 39 Curve Fitting の実行画面

近似曲線(近似多項式)の式は式(13)のようにした。なお変数 x は元データの x 成分を指している。

$$\sum_{t=0}^9 K_t (x - x_0)^t = K_0 + K_1(x - x_0) + K_2(x - x_0)^2 + \cdots + K_9(x - x_0)^9 \quad (13)$$

また、式(13)における各パラメータは以下の通りである。

$$\begin{aligned}
 K_0 &= 0.93303 \\
 K_1 &= 6.3198 \times 10^{-13} \\
 K_2 &= -6.8744 \times 10^{-24} \\
 K_3 &= 7.0141 \times 10^{-36} \\
 K_4 &= 2.4984 \times 10^{-46} \\
 K_5 &= -1.4822 \times 10^{-57} \\
 K_6 &= 3.7632 \times 10^{-69} \\
 K_7 &= -4.9566 \times 10^{-81} \\
 K_8 &= 3.3171 \times 10^{-93} \\
 K_9 &= -8.926 \times 10^{-106} \\
 x_0 &= 1.94913 \times 10^{14}
 \end{aligned}$$

ベースライン補正後、「Res_wave」として y 成分と近似曲線との残差が出力される。したがって Fityk を用いたベースライン補正と同様に、減算によってベースライン補正を行っているため、ベースラインが 0 として表示される。そのため Igor 上で y 成分に 1.0 を足すデータ処理を行い、ベースラインが 1.0 となるようにした。^[5]

Curve Fitting の実行によって得られた式(13)の近似曲線を図 40 に示す。

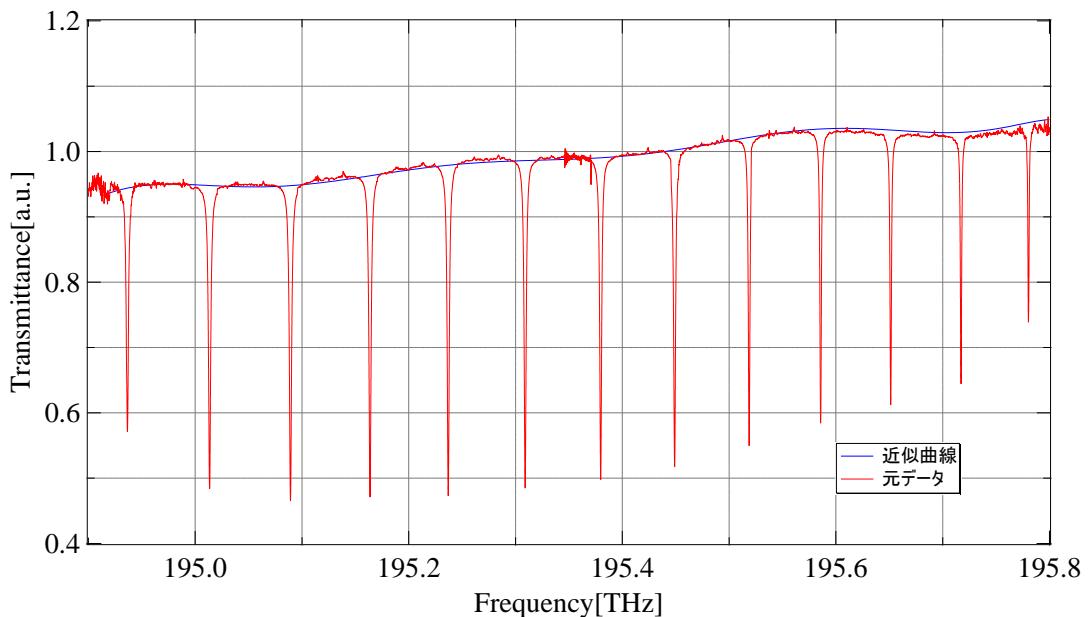


図 40 Curve Fitting によって得られた近似曲線

6.2.2 提案手法による測定結果

Curve Fitting によるベースライン補正後の吸収線スペクトルを図 41 に、拡大図を図 42 に示す。

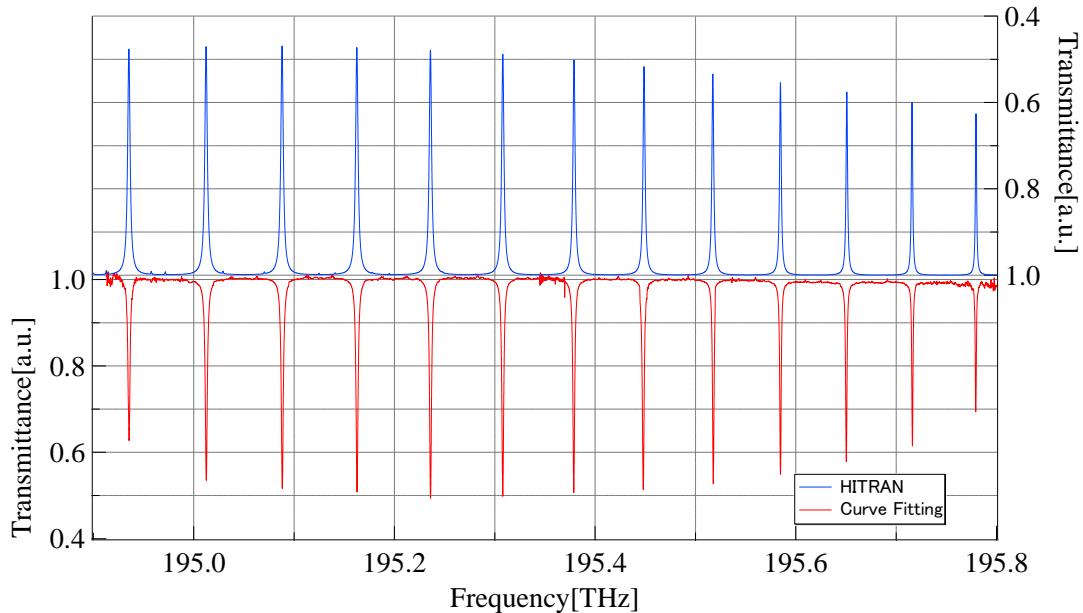


図 41 Curve Fitting によるベースライン補正後の吸収線スペクトル
(2024.12.05 実施)

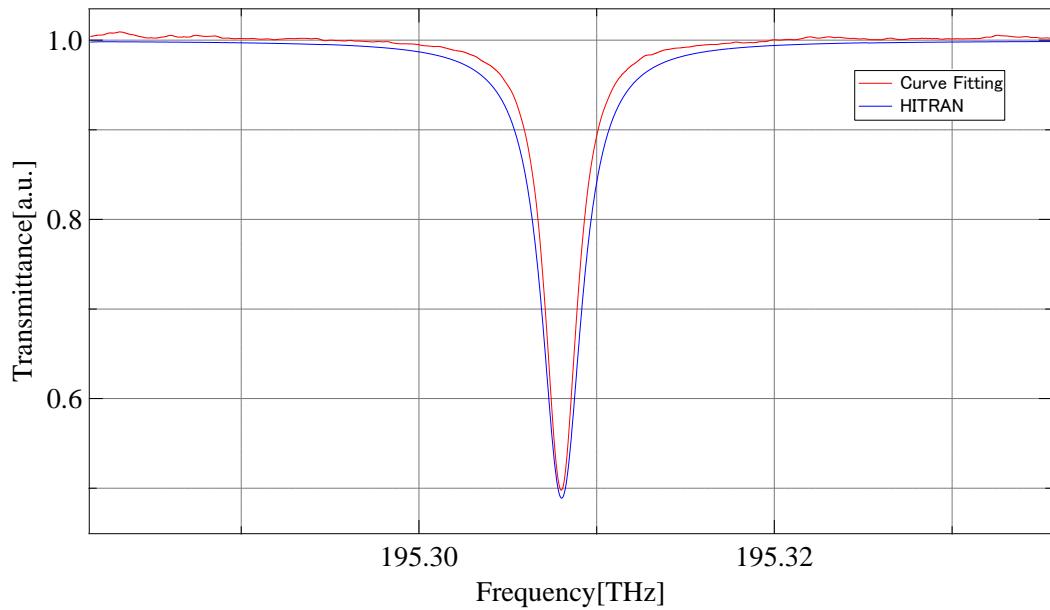


図 42 拡大図

6.2.3 測定結果による考察

図 41 から、Fityk の時と同様に元データで生じていたベースラインのズレが解消され、吸収線スペクトルも HITRAN に近い結果が取得できた。しかし、中心周波数から離れた周波数の高い側と低い側それぞれで、吸収線スペクトルの透過率が HITRAN と一致していないことがわかる。これは、元データの参照光スペクトルと透過光スペクトルの強度のズレによって、除算した際に透過率が正しく反映されていないことから、ベースライン補正を「減算」によって実行していることが原因と考えた。

本考察では、元データを式(13)によって得られる近似曲線の式で「除算」する方法を提案する。除算によって得られたベースライン補正後の吸収線スペクトルを図 43 に示す。

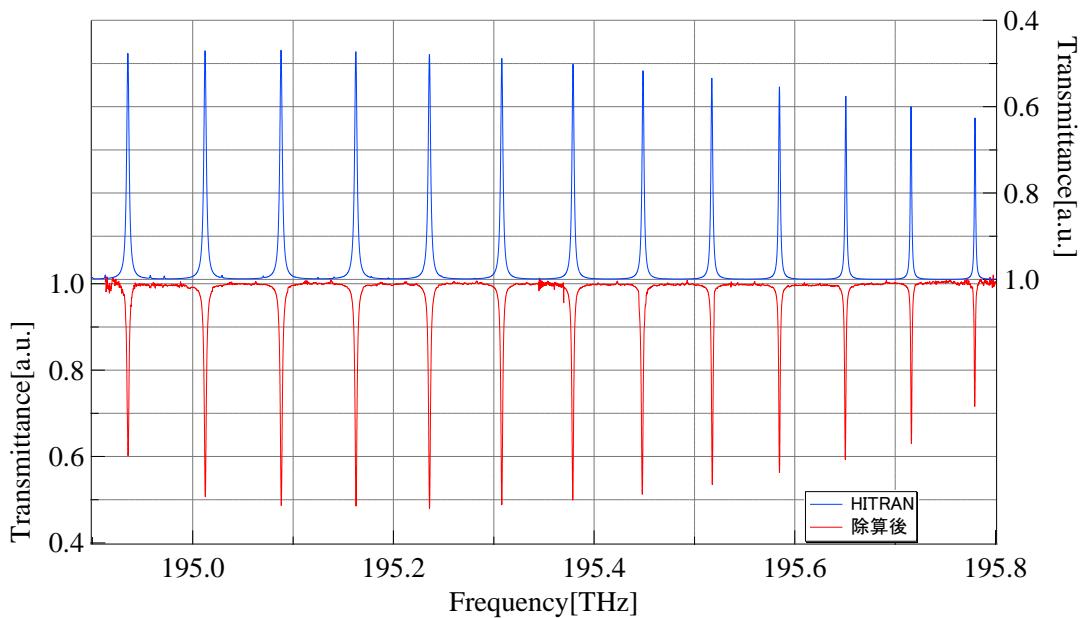


図 43 除算によるベースライン補正後の吸収線スペクトル
(2024.12.19 実施)

また、減算によるベースライン補正(除算前)と除算によるベースライン補正(除算後)の吸収線スペクトルを図 44 に示す。

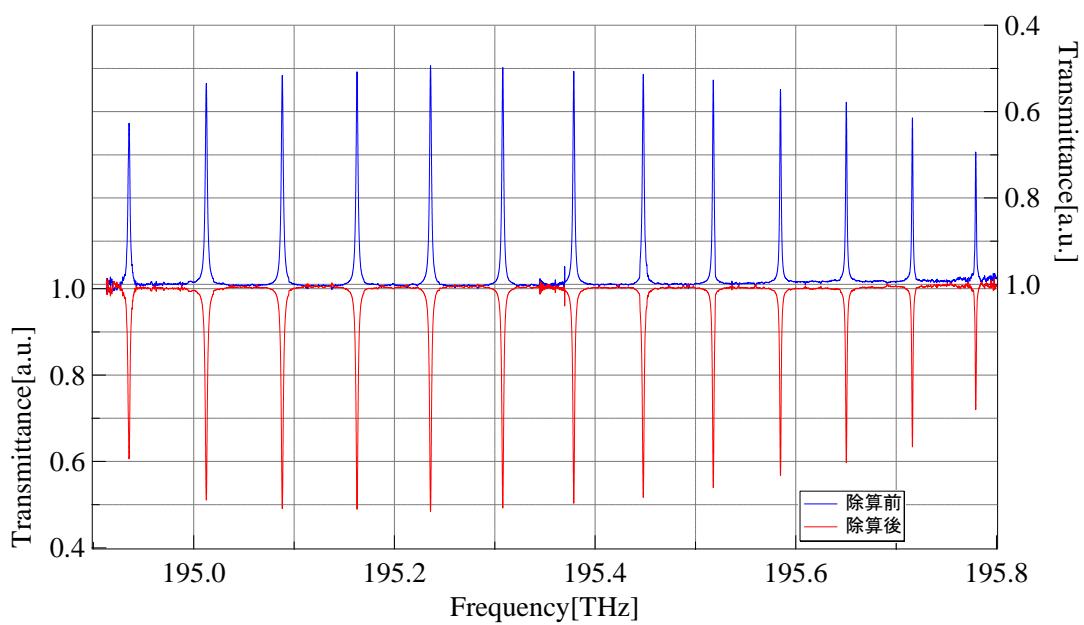


図 44 除算前後の吸収線スペクトル

図 44 から、元データと近似曲線を、「減算」ではなく「除算」によってベースライン補正を行うことで、透過率が改善され、HITRAN に近い結果を取得することができた。

本考察の提案手法により、元データと近似曲線との除算によるベースライン補正が適していると考察した。

6.2.4 今後の展望

今回 Igor 上で行った Curve Fitting では、複数ある近似曲線の中から、元データのベースラインに最も近い関数を目視で選定したため、今回ベースライン補正に用いた近似曲線及び次数が、ベースライン補正に最も適した関数であったかどうかは未知数である。

特に、元データの吸収線スペクトルのピーク値付近をマスクしたベースライン補正(ピークフィット)を行うことで、より精度の高いベースライン補正を行うことができると考える。しかし、元データのポイント数が 235,000 と非常に多いため、元データから手動でピーク値付近をマスクするのは非常に時間がかかるといった問題がある。

そこで、Igor 上にある Multipeak Fit という機能を用いてベースライン補正を行うことで、吸収線スペクトルの取得を行う方法を提案する。Multipeak Fit では、Gaussian(ガウス関数)、Lorentzian(ローレンツ関数)、Voigt(フォート関数)といった様々なピーク形状のピーク値検出が可能であり、ピークフィットに適している。^[6]

Multipeak Fit の実行結果を図 45 に示す。なおピークフィット係数である Location(ピーク位置)、Width(半値幅)、Height(高さ)を設定し、係数の値を保持することもできるが、本改善案ではすべて Auto として測定を行った。また、ベースラインは 1.0 とした。

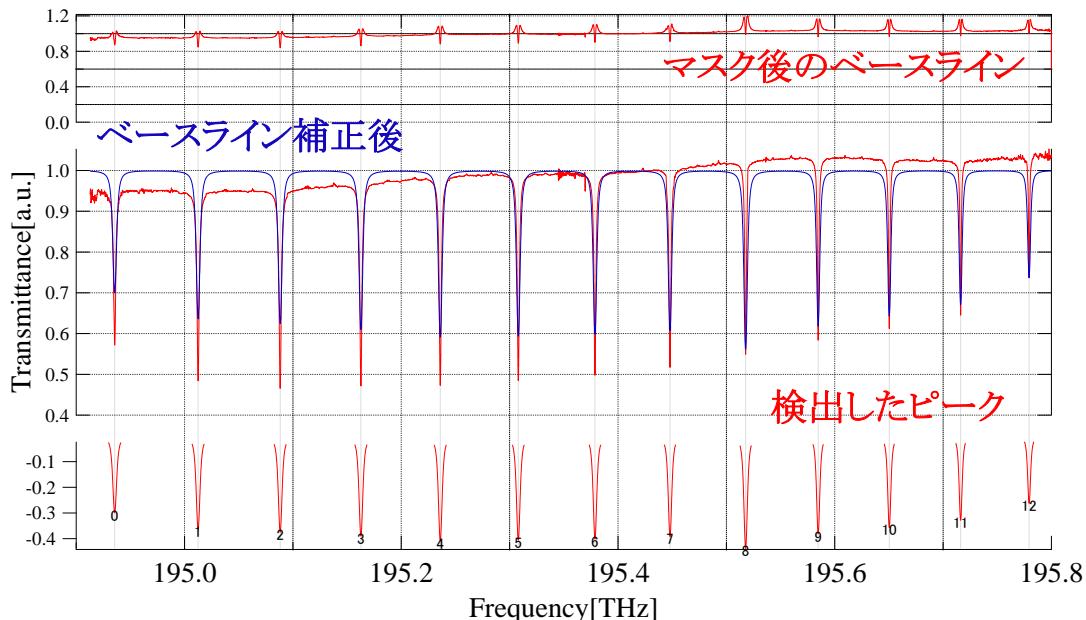


図 45 Multipeak Fit の実行結果
(2025.2.25 実施)

また、Multipeak Fit によるベースライン補正後の吸収線スペクトルを図 46 に、拡大図を図 47 に示す。

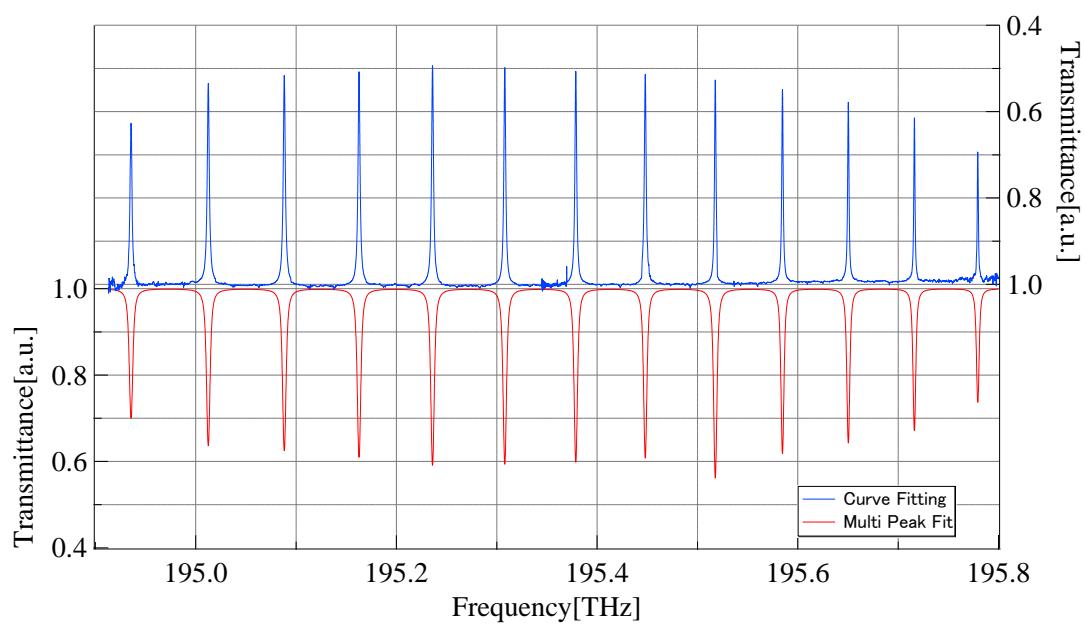


図 46 Multi peak Fit によるベースライン補正後の吸収線スペクトル
(2025.2.25 実施)

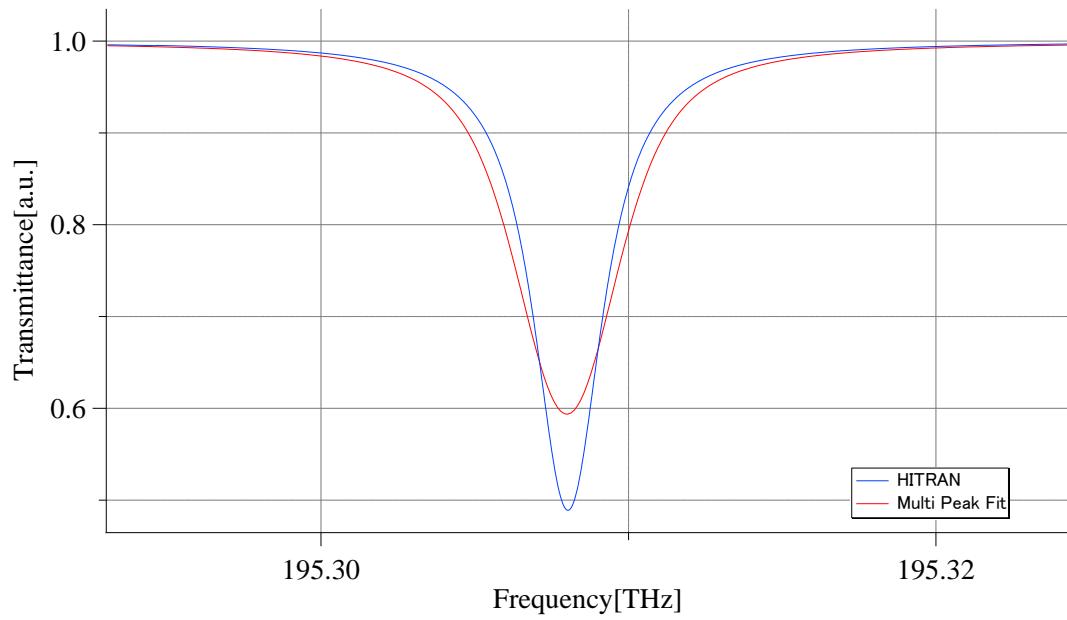


図 47 拡大図

本手法では、ピーク形状を吸収線スペクトルのピーク形状と同じであるフォート関数として設定した。図 47 から、Multipeak Fit によるベースライン補正によってベースラインが非常にきれいに補正された吸収線スペクトルを取得することができた。しかし図 45 から、マスク後のベースラインに吸収線スペクトルが入ってしまっている。これにより図 46において HITRAN と比較した際、透過率にズレが生じていることがわかる。これは、ピークフィット係数を Auto にしたためなので、ピークフィット係数を適切な値に設定し、保持することで、ベースライン補正の目標であるピークフィットを実現することができると考えた。

7. 結論

7.1 まとめ

本研究では、トリガ信号のズレによる補間精度の低下の問題を、三角波によるレーザの光周波数シフトの最適化を行うことで、トリガ信号のズレを考慮した設計を行い、補間精度の向上及び安定したデータ取得を目的として行った。

先行研究では、データ取得時間と三角波の半周期を一致させ、レーザの光周波数をシフトしていたが、トリガ信号のわずかなズレでも、三角波の折り返しがデータ取得時間内に入ってしまい、正常に補間されたデータを取得することが困難であった。

本研究では、データ取得時間は変えずに、三角波電圧波形を先行研究の 1.2 倍に拡大し、最適化することで、トリガ信号によるデータ取得のタイミングがずれても、三角波の折り返しが入らないようにし、正常に補間されたスペクトルデータを取得することができた。

また、除算によって吸収線スペクトルを取得した際に、参照光スペクトルと透過光スペクトルの強度の不一致によるベースラインの傾きに対して、2 種類のソフトウェアによってそれぞれベースライン補正を行い、ベースラインの補正を行った。

Fityk を用いたベースライン補正では、ベースラインの傾きは改善できたものの、ベースライン補正後の吸収線スペクトルの精度が悪くなってしまうといった問題があった。本考察によって、Fityk 上に取り込んだデータのポイント数が多すぎてしまったことが、精度が悪くなった原因だと考察した。

Curve Fitting を用いたベースライン補正では、Fityk と同様にベースラインの傾きの改善ができた。さらに精度が悪くなるといった問題もなく、2 種類のソフトウェアを比較した際、本提案手法の方が HITRAN に最も近い結果となった。しかし、ベースライン補正を減算によって行っていたことから、中心周波数から離れた周波数の高い側と低い側それぞれで、吸収線スペクトルの透過率が正しく反映されていないといった問題があった。本考察で行った除算によるベースライン補正によって減算の時よりもさらに改善された結果を取得することができた。

7.2 今後の展望

本研究において、最も課題となっているのがデータ処理の点である。今回、PC に取り込んだ参照光スペクトルと透過光スペクトルそれぞれのデータを Mathematica によってデータ処理を行い、その後 Igor によってグラフ表示及びデータ処理を行っている。このように複数のソフトウェアを経由している点や、これらの過程をすべて手作業で行っているため、非常に時間がかかるてしまい、デュアルコム分光法の高速な測定が可能という利点を失っている。これらのデータ処理の過程を一括して行うことで、さらなるリアルタイム観測への発展が期待できると考える。

また、他の学生の研究で、Mathematica と Igor で行っているデータ処理を、Matlab を用いて一括で行っている。Matlab を用いたデータ処理時間は、Mathematica を用いたデータ処理時間よりはやいため、本研究のテーマと、Matlab を用いたデータ処理を融合させ、さらに Matlab 上でプログラムを実行した際に、データ処理を行うと同時に、トリガ信号として用いることができれば、高速かつリアルタイム観測への期待が高まると考える。

参考文献

- [1] 大原 憲「呼気分析に向けたデュアル EOM コム分光法における自動補間法の開発」東京電機大学 工学研究科 電子システム工学専攻 修士論文 (2019)
- [2] 北本 雄大「自動補間デュアルコム分光法における境界領域スペクトルデータ処理法」東京電機大学 工学部 電子システム工学科 学士論文 (2023)
- [3] 大原 憲, 宇田 祥平, 石澤 淳, 日達 研一, Nathalie Picque, Theodor Hänsch, 西川 正「デュアル EOM コム分光における 25 GHz モード間隔の自動補間法」レーザ学会学術講演会第 39 回年次大会講演予稿集 (2019) B112pVII05
- [4] HITRAN 「HITRAN on the Web」 <<https://hitran.iao.ru/>>
- [5] HULINKS 「Igor Pro データ解析機能」
<https://www.hulinks.co.jp/software/da_visual/igor/section02/section02_d#pa>
(最終閲覧日:2024 年 12 月 19 日)
- [6] HULINKS 「Multipeak Fit パッケージの使用方法」
<<https://www.hulinks.co.jp/support/igor/multipeakfit.html>>
(最終閲覧日:2025 年 1 月 30 日)

謝辞

本研究を進めていくにあたって、多くの方からのご指導、ご助言を受け賜りましたこと、心より感謝申し上げます。

特に、研究指導教員の西川正教授には研究を進めていくうえで丁寧なご指導と多くのご助言をいただきました。心より感謝申し上げます。

堀池拓未先輩には、研究テーマを決めるにあたって多くのご助言をいただきました。心より感謝申し上げます。

光応用工学研究室の皆様とは、ともに研究を進める中で多くの考えを聞くことができましたこと、心より感謝申し上げます。